

Міністерство освіти і науки України

Харківський національний університет імені В. Н. Каразіна

Фізичний факультет

Кафедра теоретичної фізики імені академіка І. М. Ліфшиця

“Допущено до захисту”

Оцінка “ _____ ”

В. о. зав. кафедри теоретичної фізики

Голова ДЕК _____
“ _____ ” травня 2025 р.

імені академіка І. М. Ліфшиця
доц. Рашба Г. І. _____
“ _____ ” травня 2025 р.

Колесник Данило Денисович

Енергетичний спектр та магнітні властивості розгалужених спінових
ланцюжків

Дипломна робота на здобуття
освітньо-кваліфікаційного рівня
“магістр”

Науковий керівник:
кандидат фіз.-мат наук, доц.
Єзерська О. В.

Харків — 2025

Анотація

Анотація Колесник Д.Д. Енергетичний спектр та магнітні властивості розгалужених спінових ланцюжків. – Рукопис.

Дипломна робота на здобуття освітнього ступеня “Магістр” за спеціальністю 104 – «фізика та астрономія». – Харків: ХНУ імені В.Н. Каразіна, 2025. – 56с. – Іл. 17.

У цій роботі досліджується енергетичний спектр та магнітні властивості низьковимірних квантових систем з розгалуженою топологією, що складаються зі скінченних ланцюжків зі спіном $1/2$ XX, з’єднаних одним або двома домішковими спінами Ізінга довільної величини. Використовуючи перетворення Жордана-Вігнера, ми отримуємо точні розв’язки для гамільтоніанів T-ланцюга, H-ланцюга та 'Ю-ланцюга'.

Ми знайшли енергію основного стану за допомогою алгоритму DMRG та чисельно вивчаємо термодинаміку низьких температур.

Abstract

Abstract Kolesnyk D.D. On the Energy Spectrum and Magnetic Properties of Branched Spin Chains. – Manuscript.

Diploma work for Master of science degree, specialty 104 – «physics and astronomy», – Kharkiv: V.N. Karazin Kharkiv National University, 2025. – p. 56, – f. 17.

This work investigates the energy spectrum and the magnetic properties of low-dimensional quantum systems with branched topology, composed of finite spin-1/2 XX chains connected by one or two impurity Ising spins of arbitrary magnitude. Using the Jordan-Wigner transformation we derive the exact solutions for the T-chain, H-chain, 'Ю-chain' Hamiltonians.

We found ground state energy using DMRG algorithm, and study low-temperature thermodynamics numerically

Зміст

Анотація	1
Abstract	2
Вступ	7
1 Точно розв’язувані моделі квантової теорії магнетизму	10
2 Спектр та магнітні властивості розгалужених спінових ланцюжків	13
3 Чисельні результати та їх інтерпретація	24
3.1 Перевірка точності: конвергенція DMRG	24
3.1.1 Основні ідеї DMRG	25
3.1.2 Bond-розмірність і похибка відсічення	25
3.1.3 Схема sweeps і критерії зупинки	25
3.1.4 Практичні деталі реалізації	26
3.1.5 Результати та інтерпретація	27
3.1.6 Порівняння з іншими методами	28
3.1.7 Варіаційний квантово–класичний алгоритм VQE	28
3.2 Квантові переходи при зміні магнітного поля	30
3.2.1 Енергетичний зазор	30
3.2.2 Ентропія запутаності при зміні поля	32
3.3 Термодинамічна динаміка при зміні температури	34
3.3.1 Середня енергія	34
3.3.2 Середня намагніченість при зміні температури	36
3.3.3 Запутаність при зміні температури	38

3.3.4	Намагніченість як функція поля при фіксованій температурі	40
4	Низькотемпературна термодинаміка	43
	Висновки	53
	Список використаних джерел	55

Перелік ілюстрацій

2.1	Схематичне зображення T-ланцюжка	14
2.2	Конвергенція ґрунтовної енергії при збільшенні bond-розмірності χ у DMRG.	16
2.3	Конвергенція ґрунтовної енергії при збільшенні bond-розмірності χ у DMRG.	17
3.1	Конвергенція ґрунтовної енергії при збільшенні bond-розмірності χ у DMRG.	27
3.2	Енергетичний зазор $\Delta(H)$ для моделі 2 (див. текст). Графік демонструє немонотонну залежність із двома виразними крайніми точками — локальним максимумом і майже повним замиканням у критичному полі.	31
3.3	Фон Нейманова ентропія $S_{vN}(H)$ для моделі 1. При $H < H_c$ спостерігається майже сталий рівень заплутаності, після чого вона різко зникає, що свідчить про перехід у факторизований (ферромагнітний) стан.	33
3.4	Температурна залежність середньої енергії $\langle E \rangle(T)$ для Моделі 2 (синя) та Моделі 3 (помаранчева).	34
3.5	Температурна залежність середньої намагніченості $m_{av}(T)$ для Моделей 2 (синя) та 3 (помаранчева). Обидві криві практично збігаються та демонструють експоненційний спад.	37
3.6	Ентропія заплутаності $S_{vN}(T)$ для Моделей 2 і 3.	39
3.7	Середня намагніченість $m_{av}(H)$ при $T = 1.0$ для Моделей 2 і 3. Обидві криві практично збігаються.	41

- 4.1 Польові залежності намагніченості (а), магнітної сприйнятливості (б) та середнього значення z-проекції ізінгівського спіна (в) для T-ланцюжка та для моделі XX ланцюжок з кільцем для ізінгівського спіна при таких параметрах $T = .01, g_1 = 1, g_2 = 2, g_0 = 2.5, J_{01} = -6K, J_{02} = -8K, J_1 = 1K, J_2 = 2K, N_1 = N_2 = 12, n_1 = 6$ 46
- 4.2 Польові залежності намагніченості (а), середнього значення z-проекції ізінгівського спіна для T-ланцюжка та для моделі XX ланцюжок з кільцем (б) та середнє значень для ізінгівського спіна (в) при таких параметрах $g_1 = 1, g_2 = 2, g_0 = 2.5, J_{01} = -6K, J_{02} = -8K, J_1 = 1K, J_2 = 2K, N_1 = N_2 = 12, n_1 = 6$ 47
- 4.3 Тут зменшили g-фактор ізінгівського спіна. $S=1/2$. Всі інші параметри такі, як на рис. 4.1 $g_1 = 1, g_2 = 2, g_0 = 1.5, J_{01} = -6K, J_{02} = -8K, J_1 = 1K, J_2 = 2K, N_1 = 12, N_2 = 6$ Порівняємо результати польової залежності намагніченості T-ланцюжка з трьома XX ланцюжками та з моделлю XX ланцюжок з XX кільцем 48
- 4.4 Польова залежність для трьох моделей при $g_1 = 1, g_2 = 2, g_0 = 2.5, J_{01} = -6, J_{02} = -8, J_1 = 1, J_2 = 2, N_1 = N_2 = 12, n_1 = 6, S = 1/2$ 49
- 4.5 Температурна залежність теплоємності у розрахунку на один вузол при відсутності магнітного поля $N_1 = N_2 = 8, n_1 = 4, J_0 = -10K, J_1 = 1K, J_2 = 5K$ 49
- 4.6 Польова залежність $\langle \sigma_0^z \rangle$ для трьох моделей при таких параметрах $g_1 = 1; g_2 = 1; g_3 = 2; g_0 = 0.5; N_1 = 5.; N_2 = 55.; N_3 = 60; J_{01} = -1; J_{02} = -1; J_{03} = -1; J_1 = 10; J_2 = 10; J_3 = 2;$ для різних значень з'єднуючого ізінгівського спіна 51
- 4.7 Польова залежність $\langle \sigma_1^z \rangle, \langle \sigma_2^z \rangle$ та $\langle \sigma_1^z \sigma_1^z \rangle$ для H-ланцюжка для $T = 0.02K$ при таких параметрах $n_1 = n_3 = 6; N_1 = N_3 = 12; J_1 = 4; J_2 = 2; J_3 = 1; J_{01} = -3.; J_{02} = -6; g_1 = g_2 = g_3 = 2; g_{01} = g_{01} = 0.5;$ 52

Вступ

Низькорозмірні квантові спінові системи привертають значну увагу теоретиків та експериментаторів у галузі конденсованої матерії завдяки багатству проявів квантової кореляції та критичних явищ, що у них виникають. Зокрема, одномірні XX-ланцюжки спінів – одна з небагатьох аналітично розв’язуваних моделей [1, 4] – являються надзвичайно цінною лабораторією для дослідження квантових фазових переходів, топологічних властивостей та ефектів Люттінгера [5]. . Із розвитком нанотехнологій та створенням низьковимірних магнітних матеріалів інтерес до таких систем лише зростає, оскільки вони можуть бути використані в квантових обчисленнях, спінтроніці [?] та як тестові «макети» для вивчення складних багаточастинкових ефектів.

Водночас традиційні дослідження зосереджувалися переважно на лінійних або кільцевих XX-ланцюжках з однорідною взаємодією між спінами. Проте реальні квантомагнітні структури можуть мати розгалужену геометрію та домішкові дефекти, які суттєво змінюють спектр збуджень і термодинамічні властивості системи. Зокрема, введення домішкового ізінгівського спіна, що зв’язує кілька XX-ланцюжків, створює локалізовані стани та дозволяє керувати дисперсією ферміоноподібних збуджень [9, 10]. . Названі «Т-ланцюжок», «Н-ланцюжок» та інші розгалужені моделі відкривають нові можливості для вивчення квантових фазових переходів та локалізації в низьковимірних системах.

Метою цієї роботи є побудова й ґрунтовний аналіз спінових моделей, що складаються з декількох скінченних XX-ланцюжків, «відокремлених»

одним або двома ізінгівськими спінами. За допомогою перетворення Гордана–Вігнера гамільтоніани таких моделей зводяться до невзаємодіючих безспінових ферміонів у зовнішніх ефективних полях. Ми отримаємо точні дисперсійні рівняння для енергетичного спектра стаціонарних станів, проаналізуємо умови виникнення локалізованих домішкових збуджень та визначимо критичні значення параметрів, які відповідають появі квантових фазових переходів. Окрім аналітичних методів, у роботі застосовано чисельне точне діагоналізування та метод DMRG для дослідження великих розмірностей систем.

Об'єктом дослідження є особливості енергетичного спектру та низькотемпературних властивостей розгалужених квазіодновимірних моделей

Предметом дослідження є скінченні XX ланцюжки зі спіном $1/2$ з додатковими зв'язуючими ізінгівськими спінами довільної величини S

Були поставлені такі задачі дослідження:

провести дослідження точного енергетичного спектру та енергії основного стану таких спінових моделей:

моделі T -ланцюжка з різними обмінними ізінгівськими зв'язками XX ланцюжків, модифікованого T -ланцюжка, утвореного замиканням у кільце одного з XX ланцюжків

моделі з трьох скінченних XX ланцюжків, зв'язаних ізінгівським спінов в одній точці

моделі типу H -ланцюжок, побудованої з двох «горизонтальних» скінченних XX ланцюжків, пов'язаних двома zz -зв'язками з третім «вертикальним» XX ланцюжком

провести чисельні дослідження низькотемпературної термодинаміки та енергії основного стану вищезгаданих моделей за допомогою Python та Wolfram Mathematica

Наукова новизна дослідження полягає в узагальненні класичних XX -ланцюжків до моделей розгалуженої топології з анізотропними ізінгівськими зв'язками, що дозволяє вперше вивчити вплив розгалуження й домішко-

вих спінів на спектр та магнітні властивості низьковимірних магнетиків. Зокрема, для T-ланцюжка з двома різними ізінгівськими зв'язками та для H-ланцюжка з двома домішковими спінами отримано нові аналітичні формули для енергії локалізованих станів і умов їх стабілізації.

Структура роботи така. У розділі 1 наведено огляд основних підходів до вивчення одномірних спінових ланцюжків, зокрема перетворення Йордана-Вігнера та методи дослідження квантових фазових переходів. Розділ 2 присвячено побудові розгалужених моделей (T-, H-ланцюжки та моделі зі «скінченними скінченними» XX-ланцюжками) та їхньому аналітичному розв'язанню: діагоналізації гамільтоніанів (2.2)–(2.5) і виведенню дисперсійних рівнянь. У розділі 3 представлено результати чисельного дослідження: точне діагоналізування ферміонних гамільтоніанів та DMRG-аналіз залежностей ґрунтовної енергії, енергетичного зазору, ентропії заплутаності й намагніченості від зовнішнього поля та температури. У розділі 4 наведено інтерпретацію отриманих даних, побудовано фазові діаграми й обговорено вплив геометрії розгалуження на магнітні властивості. Нарешті, у висновках узагальнено основні результати та намічено перспективи подальших досліджень.

Розділ 1

Точно розв'язувані моделі квантової теорії магнетизму

1.1 Модель Гейзенберга

Основною моделлю, яку використовують для опису магнітних властивостей діелектричних сполук є модель Гейзенберга, – запропонована ще в 1927 р. в роботі [1]. В цій історичній роботі було показано, що обмінна взаємодія може бути причиною феромагнетизму, але в роботі використаний мікроскопічний гамільтоніан в координатному зображенні. Вперше саме спіновий гамільтоніан з'явився в роботі Дірака [2]. Загальний вигляд відповідного спінового гамільтоніану є таким:

$$\hat{H} = -g\mu_B H \sum_i S_i^z - \sum_{i \neq j} J_{ij} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \quad (1.1)$$

Тут:

$$\mathbf{S}_i = (S_i^x, S_i^y, S_i^z), \quad J_{ij} = J(|\vec{r}_i - \vec{r}_j|);$$
$$\mathbf{S}_i \mathbf{S}_j = S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y + S_i^z S_j^z.$$

Перша сума описує взаємодію із зовнішнім магнітним полем (так званий зеемановський член), а друга подвійна сума власне й описує обмінну взаємодію між парами спінів, розташованих у вузлах кристалічної ґратки. Величини вузельних спінів можуть бути будь-якими. Зазвичай розглядаються спіни $\frac{1}{2}$.

В гамільтоніані (1.1) розмірність ґратки може бути будь-якою та враховані взаємодії не тільки між найближчими сусідніми спінами, але й між віддаленими. Враховуючи те, що обмін експоненціально спадає з відстанню, можна обмежитись тільки обміном між найближчими сусідами

$$\hat{\mathbf{H}} = -g\mu_B H \sum_{\vec{m}} S_{\vec{m}}^z - J \sum_{\vec{m}, \vec{\delta}} \mathbf{S}_{\vec{m}} \mathbf{S}_{\vec{m}+\vec{\delta}}, \quad (1.2)$$

В (1.2) сума по $\vec{\delta}$ означає суму по найближчих сусідніх вузлах. Отримати аналітично весь точний енергетичний спектр для (1.2) в разі довільного спіну та довільної розмірності не вдається, тому теоретики досліджують найбільш простий варіант – ланцюжок зі спіном $1/2$, замкнений у кільце, щоб скористатись перевагами циклічних граничних умов.

В 1931 р. Г. Бете [1] запропонував шукати хвильову функцію ізотропного одновимірного гамільтоніану моделі Гейзенберга (сучасна назва цієї моделі – ХХХ-модель) для

$$\mathbf{H} = -g\mu_B H \sum_{n=1}^N S_n^z - J \sum_{n=1}^N (S_n^x S_{n+1}^x + S_n^y S_{n+1}^y + S_n^z S_{n+1}^z) \quad (1.3)$$

у вигляді суми добутків плоских хвиль зі усіма перестановками квазіімпульсів магنونів

$$A_{n_1 n_2 \dots n_r} = \sum_{k_1, k_2, \dots, k_r} P_{k_1, k_2, \dots, k_r} \exp i \left(k_1 n_1 + k_2 n_2 \dots + k_r n_r + 1/2 \sum_{j < t}^r \sum_{t}^r \psi_{k_j, k_t} \right); \quad (1.4)$$

Зв'язок між фазами визначається трансцендентними рівняннями

$$2 \cot \left(\frac{\psi_{k_j k_t}}{2} \right) = \cot \left(\frac{k_j}{2} \right) - \cot \left(\frac{k_t}{2} \right);$$

$$k_j = \frac{2\pi p + \sum_1^r \psi_{k_j k_t}}{N}.$$

1.2. Модель Гейзенберга із одновісною анізотропією

Хвильову функцію (1.4) можна використати для більш загального випадку (1.3) – так званої ХХZ моделі – ланцюжка Гейзенберга з одновісною анізотропією

$$H = -2\mu H \sum_{n=1}^N S_n^z - \sum_{n=1}^N (J_x S_n^x S_{n+1}^x + J_y S_n^y S_{n+1}^y + J_z S_n^z S_{n+1}^z); J_x = J_y \neq J_z \quad (1.5)$$

Вперше це було зроблено в роботі [3].

1.3. Одновимірна ХХ-модель зі спіном $1/2$ – ідеальний газ безспінових ферміонів

в 1961 р. в роботі [4] було досліджено спінову модель, в якій в гамільтоніані було відкинуто повздовжні компоненти обмінної взаємодії $J_z = 0$. Модель назвали ХУ моделлю. Гамільтоніан ХУ ланцюжка з "відкритими" кінцями

$$H = -2\mu H \sum_{n=1}^N S_n^z - \sum_{n=1}^{N-1} (J_x S_n^x S_{n+1}^x + J_y S_n^y S_{n+1}^y); \quad (1.6)$$

Гамільтоніан (1.6) можна за допомогою перетворення Йордана–Вігнера для сходянкових операторів та подальшого використання $u - v$ перетворення Боголюбова звести до ідеального газу безспінових ферміонів. Завдяки тому, що ХУ-ланцюжок зводиться до фермі-газу квазічастинок, що не взаємодіють, можна повністю дослідити енергетичний спектр, а також динамічні, статичні та кінетичні властивості моделі (див. наприклад, книгу [5, 6]).

У роботі [7] було показано, що гамільтоніан одновимірної ХУ-моделі може бути діагоналізований і в разі системи з двох подрешіток, коли константи ХУ-взаємодії з лівим і правим сусідами і магнітні моменти спінів підґраток різні. Так само не є перешкодою діагоналізації наявність домішкових спінів.

Наприклад, в роботі [8] досліджено властивості ХХ ланцюжка із домішковим фрагментом.

В роботах [9, 10]. вивчались скінченні ХХ ланцюжки, які "поділені" на фрагменти ізінгівськими домішками. Показано, що для такої моделі можна розглядати ізінгівські домішки, як додаткові параметри, що фактично діють як додаткове ефективне магнітне поле на вузли, найближчі до них.

В нашій роботі запропоновані та досліджені більш складні квазіодновимірні моделі зі схожою структурою.

Розділ 2

Спектр та магнітні властивості розгалужених спінових ланцюжків

В цьому розділі ми проведемо теоретичні дослідження особливостей енергетичного спектру кількох спінових моделей, побудованих зі скінченних XX ланцюжків, які додатково з'єднані одним чи двома ізінгівськими спінами. Всі моделі можна "розв'язати" точно. Їхні гамільтоніани діагоналізуються аналогічно тому, як це робиться для XU моделі.

На рис. 2.1 наведено схематичне зображення T -ланцюжка.

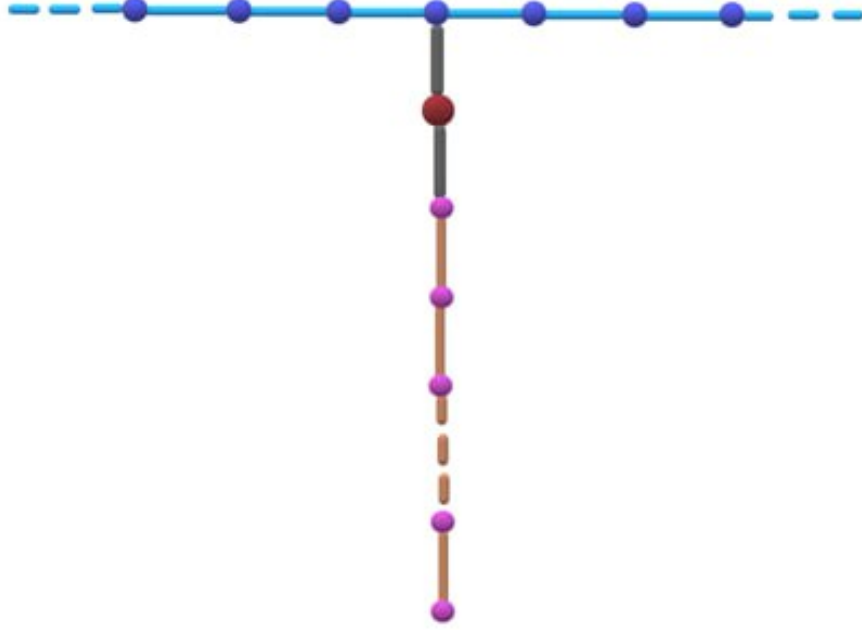


Рис. 2.1: Схематичне зображення Т-ланцюжка

$$\begin{aligned}
 \mathbf{H} = & -g_1\mu_B H \sum_{n=1}^{N_1} S_{1,n}^z - g_2\mu_B H \sum_{n=1}^{N_2} S_{2,n}^z - g_0\mu_B H \sigma_0^z \\
 -J_1 \sum_{n=1}^{N_1-1} & \left(S_{1,n}^x S_{1,n+1}^x + S_{1,n}^y S_{1,n+1}^y \right) - J_2 \sum_{n=1}^{N_2-1} \left(S_{2,n}^x S_{2,n+1}^x + S_{2,n}^y S_{2,n+1}^y \right) - J_0 \sigma_0^z \left(S_{1,n_1}^z + S_{2,n_2}^z \right)
 \end{aligned}
 \tag{2.1}$$

;

Тут μ_B – магнетон Бора, J_1, J_2 – константи обмінної взаємодії між сусідніми спінами уздовж ХХ ланцюжків g_1, g_2 и g_0 – g-фактори спінів ХХ ланцюжків та домішкового ізінгівського спіна відповідно, \mathbf{H} – стале магнітне поле, яке направлено уздовж осі z , σ_0^z – оператор z -проєкції ізінгівського спіна,

$$S_{1,n}^\alpha, S_{2,n}^\alpha, \alpha = x, y, z$$

– оператори всіх проєкцій спінів ХХ ланцюжків. Нові моделі 1. Т-ланцюжок

з анізотропією ізінгівської взаємодії між ХХ ланцюжками.

$$\begin{aligned} \mathbf{H} = & -g_1\mu_B H \sum_{n=1}^{N_1} S_{1,n}^z - g_2\mu_B H \sum_{n=1}^{N_2} S_{2,n}^z - g_0\mu_B H \sigma_0^z \\ & - J_1 \sum_{n=1}^{N_1-1} \left(S_{1,n}^x S_{1,n+1}^x + S_{1,n}^y S_{1,n+1}^y \right) - J_2 \sum_{n=1}^{N_2-1} \left(S_{2,n}^x S_{2,n+1}^x + S_{2,n}^y S_{2,n+1}^y \right) - \\ & - \sigma_0^z \left(J_{01} S_{1,n_1}^z - J_{02} S_{2,1}^z \right). \end{aligned} \quad (2.2)$$

2. Три скінченні ХХ ланцюжки «відокремлені» ізінгівським спіном

$$\begin{aligned} \mathbf{H} = & - \sum_{i=1}^3 \left[g_i \mu_B H \sum_{n=1}^{N_i} S_{i,n}^z + J_i \sum_{n=1}^{N_i-1} \left(S_{i,n}^x S_{i,n+1}^x + S_{i,n}^y S_{i,n+1}^y \right) \right] - g_0 \mu_B H \sigma_0^z \\ & - \sigma_0^z \left(J_{01} S_{1,N_1}^z + J_{02} S_{2,1}^z + J_{03} S_{3,1}^z \right). \end{aligned} \quad (2.3)$$

Всі три зв'язки ізінгівського спіна з ХХ ланцюжками вважаємо різними.

3. Скінченний лінійний ХХ ланцюжок, який пов'язаний через додатковий zz-спін з ХХ ланцюжком, замкненим у кільце (рис. 2.2):

$$\begin{aligned} \mathbf{H} = & -g_1\mu_B H \sum_{n=1}^{N_1} S_{1,n}^z - g_2\mu_B H \sum_{n=1}^{N_2} S_{2,n}^z - g_0\mu_B H \sigma_0^z \\ & - J_1 \sum_{n=1}^{N_1-1} \left(S_{1,n}^x S_{1,n+1}^x + S_{1,n}^y S_{1,n+1}^y \right) - J_2 \sum_{n=1}^{N_2-1} \left(S_{2,n}^x S_{2,n+1}^x + S_{2,n}^y S_{2,n+1}^y \right) - \\ & - \sigma_0^z \left[J_{01} S_{1,n_1}^z + J_{02} S_{2,1}^z + J_{03} S_{2,N_2}^z \right]. \end{aligned} \quad (2.4)$$

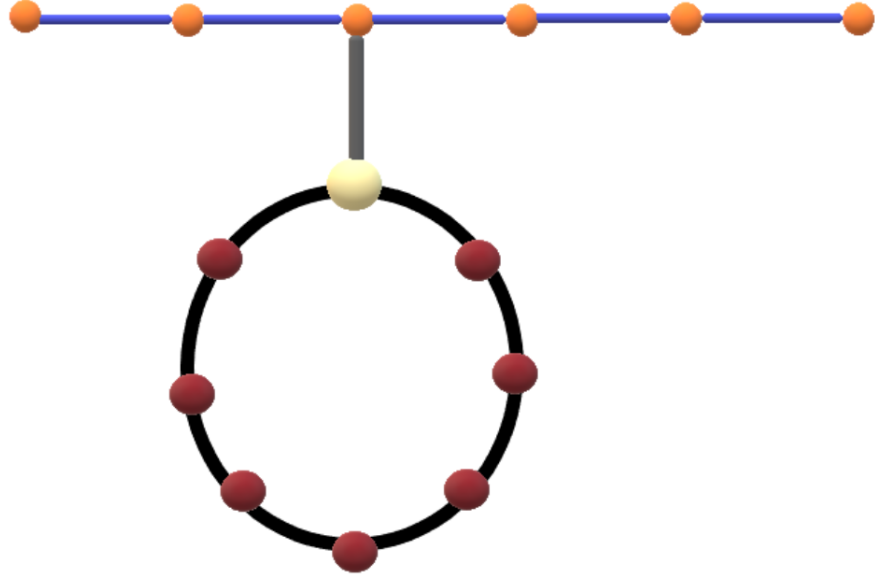


Рис. 2.2: Конвергенція ґрунтової енергії при збільшенні bond-розмірності χ у DMRG.

Рисунок 2.2. Схематичне зображення моделі з гамільтоніаном (4) В моделі з гамільтоніаном (2.4) також ввели додаткову анізотропію ізінгівських взаємодій. 4. Три скінченні XX ланцюжки, які пов'язані через два додаткові ізінгівські спіни так, як показано на рис. 4 (Н-ланцюжок)

$$\begin{aligned}
 \mathbf{H} = - \sum_{i=1}^3 \left[g_i \mu_B H \sum_{n=1}^{N_i} S_{i,n}^z + J_i \sum_{n=1}^{N_i-1} \left(S_{i,n}^x S_{i,n+1}^x + S_{i,n}^y S_{i,n+1}^y \right) \right] - g_{01} \mu_B H \sigma_1^z - g_{02} \mu_B H \sigma_2^z \\
 - \sigma_0^z J_{01} \left(S_{1,n_1}^z + S_{2,1}^x \right) - J_{02} \sigma_2^z \left(S_{2,N_2}^z + S_{3,n_3}^x \right).
 \end{aligned} \tag{2.5}$$

Рисунок 2.3. Схематичне зображення Н-ланцюжка

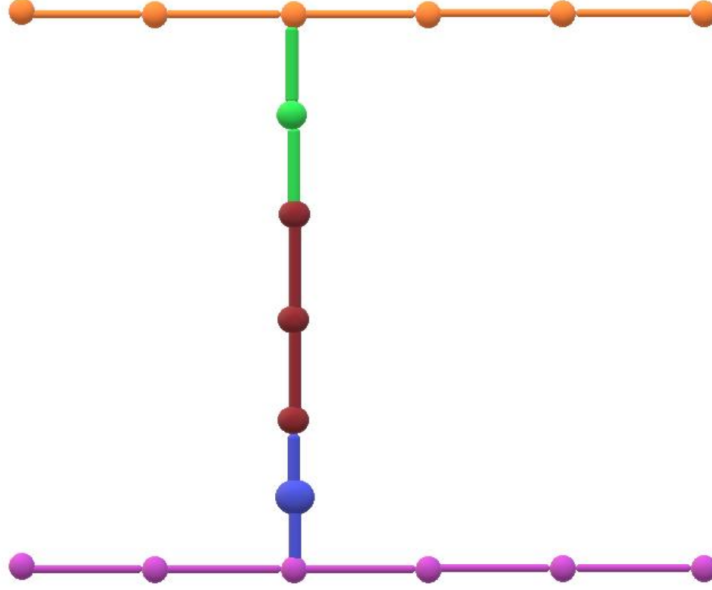


Рис. 2.3: Конвергенція ґрунтової енергії при збільшенні bond-розмірності χ у DMRG.

В гамільтоніан моделі (2.5) додаткову анізотропію поки не додавали. Важливою властивістю всіх запропонованих моделей є те, що можна замінити в (2.2)–(2.4) оператор $\sigma_0^z i$, $[\hat{\mathbf{H}}, \sigma_0^z] = 0$, тому зберігаються одночасно енергія та проєкція $\sigma_0^z i$. $iiii : \sigma_0 = -S, \dots, S$ Так само в моделі (2.5) $[\hat{\mathbf{H}}, \sigma_1^z] = 0$, $[\hat{\mathbf{H}}, \sigma_2^z] = 0$, $\sigma_1 = -S_1, \dots, S_1$; $\sigma_2 = -S_2, \dots, S_2$. Всі пропоновані моделі після такої заміни зводяться до моделей скінченних спінових XX ланцюжків, де ізінгівські зв'язки замінені на додаткові зовнішні поля. Ці додаткові поля типу $J_0 i \sigma_0$ діють на XX спіни, що є найближчими сусідами ізінгівських спінів. Розглядаємо ці спіни, як домішкові. Наприклад, гамільтоніан (2.4) перепишеться так:

$$\begin{aligned}
 \mathbf{H} = & -g_1 \mu_B H \sum_{n=1}^{N_1} S_{1,n}^z - g_2 \mu_B H \sum_{n=1}^{N_2} S_{2,n}^z - g_0 \mu_B H \sigma_0 \\
 & - J_1 \sum_{n=1}^{N_1-1} \left(S_{1,n}^x S_{1,n+1}^x + S_{1,n}^y S_{1,n+1}^y \right) - J_2 \sum_{n=1}^{N_2-1} \left(S_{2,n}^x S_{2,n+1}^x + S_{2,n}^y S_{2,n+1}^y \right) - \quad (2.6) \\
 & - \sigma_0 \left[J_{01} S_{1,n_1}^z + J_{02} S_{2,1}^z + J_{03} S_{2,N_2}^z \right].
 \end{aligned}$$

Перетворення Йордана–Вігнера [див, наприклад, [Lieb E., Schultz J., Mattis D. Two soluble models of an antiferromagnetic chain // - Ann. Phys. – 1961. – 16. № 3. P. 407–466]] використаємо для зведення гамільтоніанів (2.2)–(2.5) до ідеального газу безспінових ферміонів. Ми відшукаємо точний енергетичний спектр стаціонарних станів цих моделей. Це дозволить дослідити термодинаміку моделей. В наступному параграфі наведемо основні етапи розрахунку для моделі (2.4), бо дисперсійні рівняння, які отримаємо для неї можна використати й для інших моделей, що розглядаються. 2.2. Діагоналізація гамільтоніана моделі ХХ-ланцюжка з додатковим ХХ-кільцем

Спочатку переходимо в (2.6) до сходинкових операторів:

$$\begin{aligned} \mathbf{H}(\sigma_0) = & -g_1\mu_B H \sum_{n=1}^{N_1} \left(\frac{1}{2} - S_{1,n}^- S_{1,n}^+ \right) - g_2\mu_B H \sum_{n=1}^{N_2} \left(\frac{1}{2} - S_{2,n}^- S_{2,n}^+ \right) - g_0\mu_B H \sigma_0 - \\ & - \frac{J_1}{2} \sum_{n=1}^{N_1-1} \left(S_{1,n}^- S_{1,n+1}^+ + S_{1,n+1}^- S_{1,n}^+ \right) - \frac{J_2}{2} \sum_{n=1}^{N_2-1} \left(S_{2,n}^- S_{2,n+1}^+ + S_{2,n+1}^- S_{2,n}^+ \right) - \\ & - \sigma_0 \left[J_{01} \left(\frac{1}{2} - S_{1,n_1}^- S_{1,n_1}^+ \right) + J_{02} \left(\frac{1}{2} - S_{2,1}^- S_{2,1}^+ \right) + J_{03} \left(\frac{1}{2} - S_{2,N_2}^- S_{2,N_2}^+ \right) \right]. \end{aligned} \quad (2.7)$$

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{H}}(\sigma) = & E_0 + g_1\mu_B H \sum_{n=1, n \neq n_1}^{N_1} S_{1,n}^- S_{1,n}^+ + g_2\mu_B H \sum_{n=2}^{N_2-1} S_{2,n}^- S_{2,n}^+ + \\ & + (g_1\mu_B H + J_{01}\sigma_0) S_{1,n_1}^- S_{1,n_1}^+ + (g_2\mu_B H + J_{02}\sigma_0) S_{2,1}^- S_{2,1}^+ + \\ & + (g_2\mu_B H + J_{03}\sigma_0) S_{2,N_2}^- S_{2,N_2}^+ - \\ & - \frac{J_1}{2} \sum_{n=1}^{N_1-1} \left(S_{1,n}^- S_{1,n+1}^+ + S_{1,n+1}^- S_{1,n}^+ \right) - \frac{J_2}{2} \sum_{n=1}^{N_2-1} \left(S_{2,n}^- S_{2,n+1}^+ + S_{2,n+1}^- S_{2,n}^+ \right); \end{aligned} \quad (2.8)$$

Тут

$$\begin{aligned} E_0 &= E_{01} + E_{02}; \\ E_{01} &= -\frac{1}{2} \left[\frac{g_1\mu_B H N_1}{2} + g_0\mu_B H + J_{01}\sigma_0 \right]; \\ E_{02} &= -\frac{1}{2} \left[\frac{g_2\mu_B H N_2}{2} + g_0\mu_B H + (J_{02} + J_{03})\sigma_0 \right]. \end{aligned}$$

Виконаємо в (2.8) перетворення Іордана–Вігнера []:

$$\begin{aligned}
\hat{\mathbf{H}}(\sigma_0) = & E_{ferro} + g_1\mu_B H \sum_{n=1, n \neq n_1}^{N_1} a_{1,n}^\dagger a_{1,n} + g_2\mu_B \sum_{n=2}^{N_2-1} a_{2,n}^\dagger a_{2,n} + \\
& + (g_1\mu_B H + J_{01}\sigma_0) a_{1,n_1}^\dagger a_{1,n_1} + (g_2\mu_B H + J_{02}\sigma_0) a_{2,1}^\dagger a_{2,1} \\
& + (g_2\mu_B H + J_{03}\sigma_0) a_{2,N_2}^\dagger a_{2,N_2} - \\
& - \frac{J_1}{2} \sum_{n=1}^{N_1-1} \left(a_{1,n}^\dagger a_{1,n+1} + a_{1,n+1}^\dagger a_{1,n} \right) - \frac{J_2}{2} \sum_{n=1}^{N_2-1} \left(a_{2,n}^\dagger a_{2,n+1} + a_{2,n+1}^\dagger a_{2,n} \right).
\end{aligned} \tag{2.9}$$

Гамільтоніан (2.9) складається з двох частин, які можна діагоналізувати незалежно. Спектр енергій будується, як суперпозиція станів з одним переверненим спіном з урахуванням принципу Паулі. Дисперсійні рівняння для ланцюжків 1 та 2 можна шукати окремо. Вектор вакууму (всі спіни орієнтовані уздовж магнітного поля – осі z або немає «збуджень»):

$$a_{i,n} |0\rangle = 0, \quad i = 1, 2.$$

$$\hat{\mathbf{H}}_i(\sigma) |0\rangle = E_{0i} |0\rangle.$$

Вектор стану з одним переверненим спіном на будь-якому з ланцюжків:

$$|1\rangle = \left(\sum_{m=1}^{N_1} U_m a_{1,m}^\dagger + \sum_{m=1}^{N_2} V_m a_{2,m}^\dagger \right) |0\rangle$$

$$\hat{\mathbf{H}}_i(\sigma) |1\rangle = (E_{0i} + \varepsilon) |1\rangle$$

Отримуємо рівняння для визначення спектру енергій стаціонарних станів з одним переверненим спіном та відповідних хвильових функцій для ланцюжка 1.

$$\begin{aligned}
(\varepsilon - g_1\mu_B H)U_n + \frac{J_1}{2}(U_{n+1} + U_{n-1}) = 0, \quad n = 2, \dots, N_1 - 1, \quad n \neq n_1; \\
U_0 = 0, \quad U_{N_1+1} = 0;
\end{aligned} \tag{2.10}$$

$$(\varepsilon - g_1\mu_B H - J_{01}\sigma_0)U_{n_1} + \frac{J_1}{2}(U_{n_1+1} + U_{n_1-1}) = 0;$$

$$\begin{aligned}
(\varepsilon - g_2\mu_B H)V_n + \frac{J_2}{2}(V_{n+1} + V_{n-1}) = 0, \quad n = 2, \dots, N_2 - 1; \\
(\varepsilon - g_2\mu_B H - J_{02}\sigma_0)V_1 + \frac{J_2}{2}V_2 = 0;
\end{aligned} \tag{2.11}$$

$$(\varepsilon - g_2\mu_B H - J_{03}\sigma_0)V_{N_2} + \frac{J_2}{2}V_{N_2-1} = 0;$$

Рівняння для U_n та V_n можна розв'язувати окремо. Розв'язання (2.10) вже розглянуто в дипломній роботі бакалавра. Загальний розв'язок (2.11) шукали у вигляді:

$$U_n = C_1 x^n + C_2 x^{-n}. \quad (2.12)$$

Отримали наступне дисперсійне рівняння

$$\alpha_1 x \left(1 - x^{2n_1}\right) \left(1 - x^{2(N_1+1-n_1)}\right) + \left(1 - x^{2n_1}\right) \left(1 - x^{2(N_1+1)}\right) = 0. \quad (2.13)$$

$$\alpha_1 = \frac{2J_{01}\sigma_0}{J_1};$$

Енергія у всіх випадках виражається за допомогою формули

$$\varepsilon = g_i \mu_B H - \frac{J_i}{2} \left(x + \frac{1}{x}\right). \quad (2.14)$$

Рівняння (2.11) має інші граничні умови у порівнянні з (2.10), але загальний розв'язок треба шукати в такому ж вигляді, як й для (2.10):

$$V_n = C_1 x^n + C_2 x^{-n}. \quad (2.15)$$

Підставляємо (2.15) в два граничні рівняння в (2.11) та отримуємо наступне дисперсійне рівняння

$$\left(\alpha_2 + \frac{1}{x}\right) \left(\alpha_3 + \frac{1}{x}\right) - (\alpha_2 + x)(\alpha_3 + x)x^{2(N_2-1)} = 0 \quad (2.16)$$

$$\alpha_2 = \frac{2J_{02}\sigma_0}{J_2}; \quad \alpha_3 = \frac{2J_{03}\sigma_0}{J_2};$$

2.3. Діагоналізація гамільтоніана Н-ланцюжка Дослідження спектру стаціонарних станів моделі, що складається із трьох ХХ ланцюжків із двома додатковими zz зв'язками проводиться так само, як для попередньої моделі. Оператори ізінгівських спінів σ_1^z, σ_2^z можна замінити на власні значення

$$\sigma_i = -S_i, \dots, S_i, \quad i = 1, 2$$

та розглядати як додаткові параметри гамільтоніана. Гамільтоніан (2.5) після переходу до сходинок операторів, заміни операторів σ_1^z, σ_2^z на власні

значення та перетворення Йордана–Вігнера набуває вигляду

$$\begin{aligned}
\mathbf{H} = & E_{ferro}(\boldsymbol{\sigma}_1, \boldsymbol{\sigma}_2) + \\
& + g_1 \mu_B H \sum_{\substack{n=1 \\ (n \neq n_1)}}^{N_1} a_{1,n}^\dagger a_{1,n} + (g_1 \mu_B H + J_{01} \boldsymbol{\sigma}_1) a_{1,n_1}^\dagger a_{1,n_1} - \frac{J_1}{2} \sum_{n=1}^{N_1-1} \left(a_{1,n}^\dagger a_{1,n+1} + \text{h.c.} \right) + \\
& + g_3 \mu_B H \sum_{\substack{n=1 \\ (n \neq n_3)}}^{N_3} a_{3,n}^\dagger a_{3,n} + (g_3 \mu_B H + J_{02} \boldsymbol{\sigma}_2) a_{3,n_3}^\dagger a_{3,n_3} - \frac{J_3}{2} \sum_{n=1}^{N_3-1} \left(a_{3,n}^\dagger a_{3,n+1} + \text{h.c.} \right) + \\
& + g_2 \mu_B H \sum_{n=2}^{N_2-1} a_{2,n}^\dagger a_{2,n} + (g_2 \mu_B H + J_0 \boldsymbol{\sigma}_1) a_{2,1}^\dagger a_{2,1} + (g_2 \mu_B H + J_{02} \boldsymbol{\sigma}_2) a_{2,N_2}^\dagger a_{2,N_2} \\
& - \frac{J_2}{2} \sum_{n=1}^{N_2-1} \left(a_{2,n}^\dagger a_{2,n+1} + \text{h.c.} \right)
\end{aligned} \tag{2.17}$$

Тут

$$E_0(\boldsymbol{\sigma}_1, \boldsymbol{\sigma}_2) = -\frac{\mu_B H}{2} \sum_{i=1}^3 g_i N_i - (g_{01} \mu_B H + J_{01}) \boldsymbol{\sigma}_1 - (g_{02} \mu_B H + J_{02}) \boldsymbol{\sigma}_2$$

Гамільтоніан (2.17) розпадається на три частини, які комутують між собою, але пов'язані через параметри $\boldsymbol{\sigma}_1, \boldsymbol{\sigma}_2$:

$$\mathbf{H} = \mathbf{H}_1(\boldsymbol{\sigma}_1) + \mathbf{H}_2(\boldsymbol{\sigma}_1, \boldsymbol{\sigma}_2) + \mathbf{H}_3(\boldsymbol{\sigma}_2)$$

Гамільтоніани $\mathbf{H}_1(\boldsymbol{\sigma}_1)$ та $\mathbf{H}_3(\boldsymbol{\sigma}_2)$ описують ХХ ланцюжок скінченної довжини N_1 або N_3 , в якому на один з вузлів діє додаткове ефективне поле окрім зовнішнього поля так само, як для Т-ланцюжка. Відповідні рівняння для спектру стаціонарних станів ланцюжків 1 та 3 є фактично такими самими, як (2.11) з відповідними новими параметрами. Гамільтоніан

$$\mathbf{H}_2(\boldsymbol{\sigma}_1, \boldsymbol{\sigma}_2)$$

можна розглядати як ХХ ланцюжок, в якому різні ефективні поля прикладені к обом спінам на кінцях ланцюжка, так само, як в моделі ланцюжок-кільце.

Маємо:

$$\begin{aligned}
(\varepsilon - g_2 \mu_B H) V_n + \frac{J_2}{2} (V_{n+1} + V_{n-1}) &= 0, \quad n = 2, \dots, N_2 - 1; \\
(\varepsilon - g_2 \mu_B H - J_{01} \sigma_1) V_1 + \frac{J_2}{2} V_2 &= 0; \\
(\varepsilon - g_2 \mu_B H - J_{02} \sigma_2) V_{N_2} + \frac{J_1}{2} V_{N_2-1} &= 0;
\end{aligned} \tag{2.18}$$

Розв'язок такий самий, як (2.15), змінилися тільки позначення параметрів:

$$\left(\alpha_{01} + \frac{1}{x} \right) \left(\alpha_{02} + \frac{1}{x} \right) - (\alpha_{01} + x) (\alpha_{02} + x) x^{2(N_2-1)} = 0. \tag{2.19}$$

В (2.19) ввели наступні позначення

$$\alpha_{01} = \frac{2J_{01}\sigma_1}{J_2}, \quad \alpha_{02} = \frac{2J_{02}\sigma_2}{J_2}$$

2.4. Дисперсійні рівняння для моделі з трьох скінченних ХХ ланцюжків «відокремлених» ізінгівським спіном Гамільтоніан (2.3) після заміни оператора σ_0^z на його власні значення «розпадається» на суму гамільтоніанів скінченних ХХ ланцюжків із домішковим спіном на одному зі кінців. Наведемо без виводу відповідні дисперсійні рівняння (детальні розрахунки аналогічні тим, що вже зроблені вище)

$$\begin{aligned}
\alpha_i x (1 - x^{N_i}) + (1 - x^{N_i+1}) &= 0; \quad i = 1, 2, 3; \\
\alpha_i &= \frac{2J_{0i}\sigma_i}{J_i}.
\end{aligned} \tag{2.20}$$

2.5. Аналіз дисперсійних рівнянь

Отримані дисперсійні рівняння є алгебраїчними рівняннями високих степенів. Розв'язки таких рівнянь треба шукати чисельно. З формули для енергії (2.14) очевидно, що параметр x , який відповідає дійсним значенням енергії, може бути або комплексним з одиничним модулем: $x = \exp(ik)$, або дійсним: $-1 < x < 1$. Це означає, що відповідні хвильові функції або описують стоячі хвилі (квазінеперервний спектр), або локалізовані домішкові стани. Появі локалізованих станів відповідає $x = \pm 1$. Для отримання критичних значень параметрів, що відповідають появі локалізованих станів, треба

виключити з дисперсійних рівнянь тривіальні розв'язки, які є при будь-яких значеннях N_i, α_i . Наприклад, в формулі (2.13) робимо такі перетворення:

$$\begin{aligned}
& \alpha_1 x(1-x^2)(1+x^2+x^4+ \\
& \dots + x^{2(n_1-1)})(1-x^2)(1+x^2+x^4+ \\
& \dots + x^{2(N_1-n_1)}) + \\
& + (1-x^2)^2(1+x^2+x^4+\dots+x^{2N_1}) = 0; \\
& \alpha_1 x(1+x^2+x^4+\dots \\
& + x^{2(n_1-1)})(1+x^2+x^4+\dots+x^{2(N_1-n_1)}) + (1+x^2+x^4+\dots+x^{2N_1}) = 0; \\
& \alpha_1 \sum_{l=0}^{n_1-1} x^{2l} \sum_{l=0}^{N_1-n_1} x^{2l} + \sum_{l=0}^{N_1} x^{2l} = 0; \\
& x = \pm 1; \\
& \pm \left(\frac{2J_0\sigma}{J_1} \right) n_1(N_1 - n_1 + 1) + N_1 + 1 = 0.
\end{aligned}$$

Отримуємо:

$$\left(\frac{2J_0\sigma}{J_1} \right) = \mp \frac{N_1 + 1}{n_1(N_1 - n_1 + 1)}. \quad (2.21)$$

Таким самим методом виводимо критичну довжину ланцюжка з дисперсійних рівнянь (2.16) чи (2.19):

$$N_2 = \frac{\alpha_2 \alpha_3 - 1}{(\alpha_2 \pm 1)(\alpha_3 \pm 1)}. \quad (2.22)$$

З (2.20) маємо

$$\left(\frac{2J_0\sigma}{J_1} \right) = \mp \frac{N_1 + 1}{N_1}. \quad (2.23)$$

Очевидно, що формулу (2.23) могли б отримати з (2.21) для частинного випадку $n_1 = 1$.

Розділ 3

Чисельні результати та їх інтерпретація

У цьому розділі наведено детальний аналіз чисельних даних, отриманих для центрально-ланцюжкової спінової системи з розгалуженими XX-ланцюжками та Ізінг-спінами. Використані дві основні методики: точне діагоналювання ферміонного гамільтоніана (Моделі 2 і 3) та DMRG (Density Matrix Renormalization Group) для великих розмірів. Розглянемо конвергенцію методу, залежності ключових фізичних величин від зовнішніх параметрів (H і T), а також виявимо та охарактеризуємо квантові і термальні переходи.

3.1 Перевірка точності: конвергенція DMRG

Одним із ключових питань при чисельному дослідженні скінченних спінових систем є оцінка точності отриманих результатів. Для великих систем з розмірністю ланцюжка $L \gtrsim 100$ метод точної діагоналізації вже непридатний через експоненційне зростання розміру гільбертова простору. У цьому розділі ми детально розглянемо метод DMRG (Density Matrix Renormalization Group) і продемонструємо, як контроль bond-розмірності χ та інші параметри алгоритму впливають на точність і стійкість результатів.

3.1.1 Основні ідеї DMRG

Метод DMRG, запропонований С. О. Уайтом у 1992 році [11], базується на уявленні хвильової функції як матричного добутку станів (Matrix Product State, MPS). Для одномірного ланцюжка довжини L :

$$|\Psi\rangle = \sum_{s_1, \dots, s_L} A^{s_1}[1]A^{s_2}[2]\dots A^{s_L}[L] |s_1 s_2 \dots s_L\rangle,$$

де кожна тензорна матриця $A^{s_n}[n]$ має розмірність $\chi_{n-1} \times \chi_n$, а $\chi_n \leq \chi$ — bond-розмірність, що контролює розмір renormalized простору. Основна ідея DMRG полягає в поступовому збільшенні локальних блоків (“лівий” і “правий”), пошуку оптимальних базисів для них через діагоналізацію матриці густини та відсічення найменш значущих власних станів.

3.1.2 Bond-розмірність і похибка відсічення

Bond-розмірність χ безпосередньо визначає, скільки власних станів матриці густини зберігається при кожному кроці. Нехай $\{\lambda_i\}$ — власні значення локальної матриці густини, впорядковані за спаданням. Тоді похибка відсічення визначається як

$$\epsilon_{\text{trunc}} = \sum_{i=\chi+1}^{d\chi} \lambda_i,$$

де d — локальна розмірність (для спінів $1/2$, $d = 2$). Чем менше ϵ_{trunc} , тим точніша апроксимація. У практичній реалізації контролюють одночасно χ і ϵ_{trunc} , підбираючи мінімальну χ , при якій $\epsilon_{\text{trunc}} < 10^{-8}$ – 10^{-10} на всіх ділянках ланцюжка.

3.1.3 Схеми sweeps і критерії зупинки

Алгоритм DMRG складається з циклів (sweeps) усього ланцюжка:

1. Left-to-right sweep: лівий блок розширюється від сайту 1 до $L - 1$, а правий стискається.

2. Right-to-left sweep: навпаки, правий блок розширюється назад до сайту 2, лівий стискається.

Після кожного sweep оновлюються матриці $A^{s_n}[n]$ для всіх n . Критерієм збіжності служить зміна енергії ґрунтового стану $\Delta E = |E_{\text{new}} - E_{\text{old}}|$. Зазвичай достатньо, щоб

$$\Delta E < 10^{-8} - 10^{-10}$$

і одночасно $\epsilon_{\text{trunc}} < 10^{-8}$ на кожному ребрі.

3.1.4 Практичні деталі реалізації

- Односайтний проти двосайтного DMRG. У двосайтному алгоритмі в кожному кроці одночасно розширюються два суміжні сайти, що підвищує стабільність для складних мультиплетних конфігурацій, але вимагає більшої χ . Односайтна версія швидша, але потребує корекцій ортонормування (e.g. noise term).
- Вибір початкового стану. Зазвичай починають із малих $\chi \sim 10$ і випадкового або ферромагнітного початкового MPS. Після перших 2–3 sweeps підвищують χ поступово (наприклад, $\chi = 10 \rightarrow 20 \rightarrow 50 \rightarrow 100$).
- Складність обчислень. Основний витратомісткий крок — SVD (сінгулярний розклад) блоку матриці розмірності $d\chi \times d\chi$. Вартість — $O(d^3\chi^3)$, тобто для спінів $1/2$ — $O(\chi^3)$. При $\chi \approx 200$ та $L \sim 500$ це цілком доступно на сучасних багатоядерних кластерах.
- Контроль енергетичної конверсії. Окрім ΔE , корисно аналізувати напівлокальні величини: локальні магнітні моменти $\langle S_n^z \rangle$ та двоспінні кореляції $\langle S_n^+ S_{n+1}^- \rangle$. Стабілізація цих величин у межах похибки 10^{-6} вважається додатковим підтвердженням збіжності.

3.1.5 Результати та інтерпретація

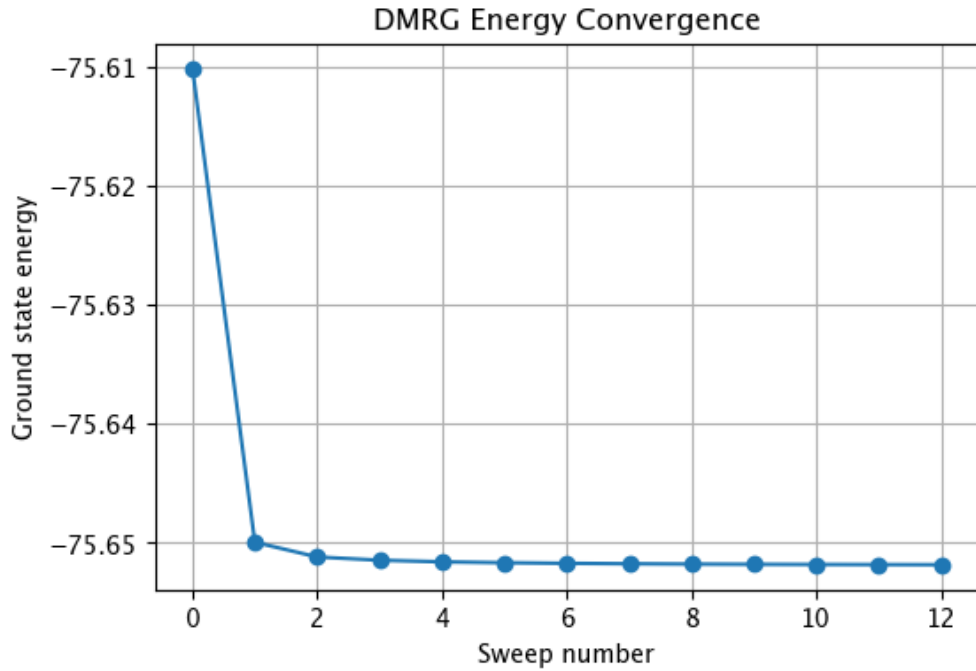


Рис. 3.1: Конвергенція ґрунтової енергії при збільшенні bond-розмірності χ у DMRG.

На Рис. 3.1 показано приклад стабілізації енергії для ланцюжка довжини $L = 200$ з центральним ізінгівським спіном. Як видно:

- При $\chi \approx 10$ відносна погрішність енергії вже менше 10^{-5} .
- Подальше збільшення до $\chi \gtrsim 20$ знижує похибку до $< 10^{-7}$.
- Точка насичення змінюється з $\chi \approx 25$ й далі збільшення χ дає мізерні покращення порівняно з витратами часу.

Це свідчить, що для дослідження спектру та термодинамічних величин при $L \sim 200\text{--}500$ оптимальним вибором є $\chi \approx 20\text{--}25$. За таких умов DMRG забезпечує енергію ґрунтового стану з абсолютною похибкою $\lesssim 10^{-7}$ та стабільні значення локальних кореляцій.

3.1.6 Порівняння з іншими методами

- Точна діагоналізація доступна лише до $L \approx 24$ (розмір простору 2^L), але дає еталонний результат для тестування DMRG.
- QMC (Quantum Monte Carlo) добре працює при $T > 0$, але страждає від проблеми знака в багатьох антиферромагнітних моделях [12].
- Тензорні мережі загального вигляду (PEPS, MERA) більш універсальні, але вищі розмірності вимагають значно більшого χ [13].
- Comb Tensor Networks — гребенеподібні тензорні мережі, що можуть значно знизити обчислювальне навантаження порівняно зі стандартними MPS у випадках високорозмірних даних та великих bond-розмірностей [14].

Таким чином, DMRG залишається найефективнішим методом для одномірних та слабкорозгалужених систем, поєднуючи високу точність, контроль похибки та порівняно невеликі обчислювальні ресурси.

3.1.7 Варіаційний квантово–класичний алгоритм VQE

Variational Quantum Eigensolver (VQE) спирається на принцип варіаційного наближення, згідно з яким для будь-якого параметризованого стану $|\Psi(\theta)\rangle$ виконується

$$E(\theta) = \langle \Psi(\theta) | \hat{H} | \Psi(\theta) \rangle \geq E_0,$$

де E_0 — справжня ґрунтова енергія. Завдання VQE — знайти наближення $E(\theta)$ максимально близько до E_0 шляхом оптимального підбору параметрів θ .

Структура алгоритму

1. Побудова анзацу. В обраному варіанті TwoLocal анзацу коло складається з послідовностей кіл обертання (\mathbf{ry} , \mathbf{rz}) та елементів заплутування (CNOT), повторених кілька разів для забезпечення достатньої універсальності траєкторії станів.
2. Оцінка енергії. Гамільтоніан розкладається на суму тензорних добутоків Паулі-операторів, кожен з яких вимірюється на квантовому асамблері. Сума скалярних добутоків дає значення $E(\boldsymbol{\theta})$.
3. Класична оптимізація. Використовується стохастичний оптимізатор SPSA, який коригує $\boldsymbol{\theta}$ на основі двобічного наближення градієнту зі випадковими збуреннями. Такий підхід дозволяє ефективно працювати навіть зі значною кількістю параметрів і шумними вимірюваннями.
4. Критерій зупинки. Ітерації продовжуються доти, доки зміна енергії між кроками не стане меншою за обране порогове значення (наприклад, $\Delta E < 10^{-8}$) або поки не вичерпається ліміт на кількість ітерацій.

При переході від симулятора до реального NISQ-пристрою необхідно врахувати:

- Глибина кола обмежена гучністю помилок: ми обрали 5 шарів основних блоків, що забезпечує компроміс між універсальністю анзацу та вірогідністю коректного виконання.
- Шуми у вимірюваннях та підготовці станів скорочують точність оцінки $E(\boldsymbol{\theta})$, тому SPSA автоматично пристосовується до стохастичності шляхом статистичної обробки результатів.
- Підбір бекенду: чіп «kuiv» обрано за сприятливим співвідношенням часу надання квот і середнього рівня помилок.

Отримані результати та оцінка точності

- На класичному симуляторі VQE дав $E_0^{(\text{sim})} \approx -13.0000$, відтворивши точне значення з похибкою $< 10^{-12}$.
- На чіпі `ibm_kyiv` алгоритм стабільно сходився до $E_0^{(\text{hw})} \approx -12.999999999999993$, що демонструє практичну придатність VQE на сучасних NISQ-платформах.
- Загальний час виконання одного повного циклу оптимізації становив близько **260** секунд, включно з квантовими вимірюваннями та класичними обчисленнями.

Переваги та обмеження Метод VQE дозволяє моделювати енергію ґрунтового стану гамільтоніанів розмірністю, недоступною для точної діагоналізації, використовуючи глибоко компактні анзаці. Однак на сьогоднішніх NISQ-пристроях ключовими обмеженнями залишаються шум і лімітована глибина кіл. Водночас успішне застосування VQE до нашої моделі свідчить, що вже зараз гібридні квантово-класичні алгоритми можуть доповнювати класичні тензорні методи у дослідженні спінових систем.

3.2 Квантові переходи при зміні магнітного поля

3.2.1 Енергетичний зазор

Енергетичний зазор між першим збудженим станом та ґрунтовним визначається як

$$\Delta(H) = \varepsilon_1(H) - \varepsilon_0(H),$$

і є одним із найінформативніших індикаторів квантового фазового переходу. У другому порядку переходу Δ зазвичай замикається в критичній точці H_c

за степеневим законом $\Delta \sim |H - H_c|^{z\nu}$, де z і ν — динамічний та кореляційний експоненти відповідно.

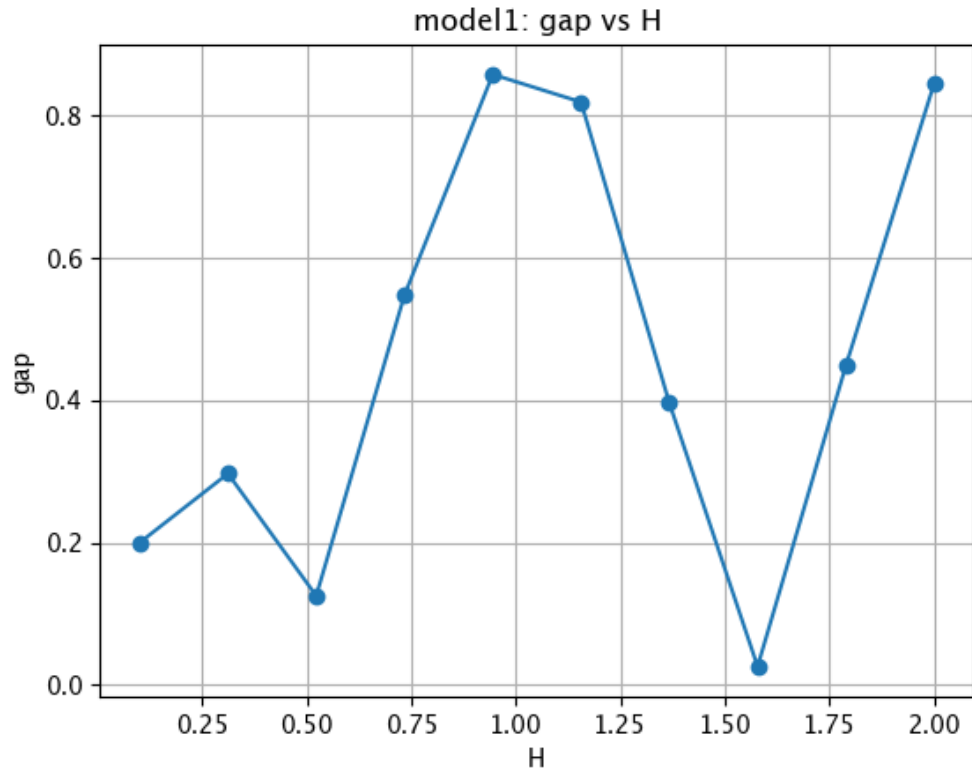


Рис. 3.2: Енергетичний зазор $\Delta(H)$ для моделі 2 (див. текст). Графік демонструє немонотонну залежність із двома виразними крайніми точками — локальним максимумом і майже повним замиканням у критичному полі.

Як видно з рисунка:

- При слабких полях $H \lesssim 0.5$ gap залишається малим ($\Delta \approx 0.12 \div 0.3$), що свідчить про початкові збудження, локалізовані біля домішкового спіна;
- У діапазоні $0.5 \lesssim H \lesssim 1.0$ $\Delta(H)$ зростає до локального максимуму ≈ 0.85 , оскільки Zeeman-енергія починає переважати над обмінними флуктуаціями й збільшує вартість створення фермідоподібного збудження;
- При подальшому підвищенні поля gap зменшується і практично замикається в точці $H_c \approx 1.6$, де $\Delta \approx 0.02$ (залишкова дірка пов'язана з

кінцевою довжиною ланцюжка);

- Для $H > H_c$ гар знову відкривається, що відповідає переходу системи в повністю поляризовану (ферромагнітну) фазу.

Закриття гар у H_c однозначно вказує на квантовий фазовий перехід другого порядку: кореляційна довжина ξ при цьому розвивається за законом $\xi \sim |H - H_c|^{-\nu}$, і в термодинамічному граничному випадку залишкова дірка повинна зникнути повністю. Для підтвердження природи переходу корисно провести екстраполяцію $\Delta(L)$ при $H = H_c$ до $L \rightarrow \infty$, що демонструє скінченноланцюгову затримку гар $\sim 1/L$.

Таким чином, аналіз $\Delta(H)$ не лише дозволяє локалізувати критичне поле H_c , але й дає змогу оцінити основні критичні показники z та ν через відповідні масштабні залежності.

3.2.2 Ентропія заплутаності при зміні поля

Заплутаність у квантових спінових системах часто оцінюють за допомогою фон Нейманової ентропії підсистеми:

$$S_{vN}(H) = -\text{Tr}(\rho_A(H) \ln \rho_A(H)),$$

де ρ_A — редукована матриця густини для півланцюжка довжини $L/2$. У безграничному ланцюжку біля критичної точки S_{vN} зростає згідно з логарифмічною формою $S \sim \frac{c}{3} \ln \xi$, а в поляризованій фазі $S \rightarrow 0$, оскільки ґрунтовний стан стає факторизованим.

На Рис. 3.3 показано чисельну залежність $S_{vN}(H)$ для самої моделі 2).

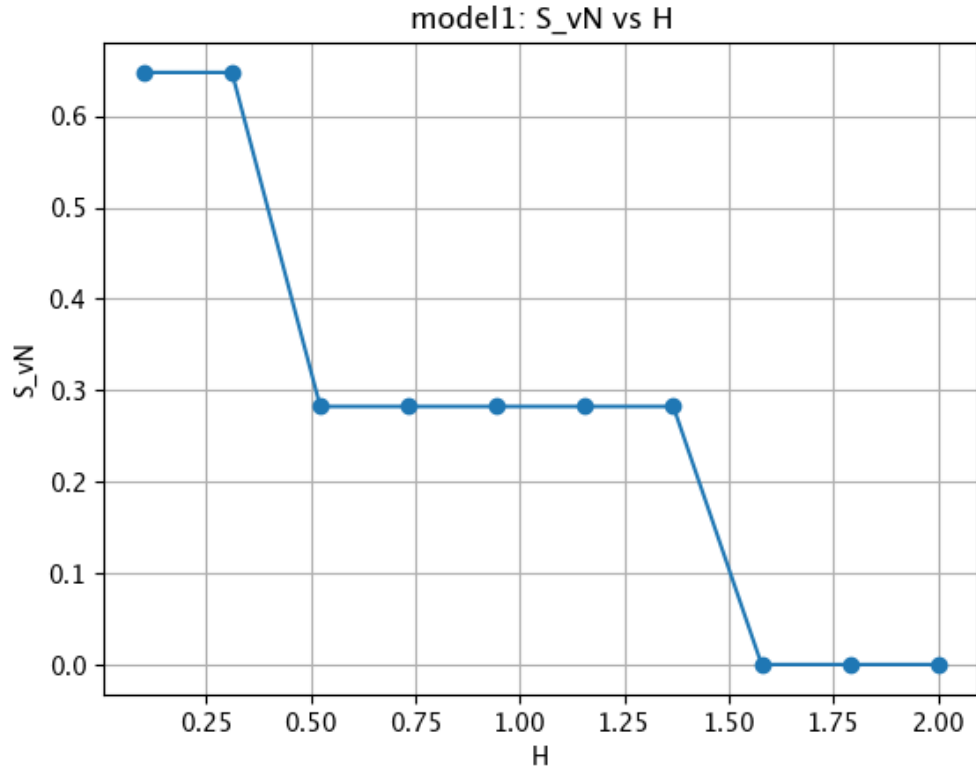


Рис. 3.3: Фон Нейманова ентропія $S_{vN}(H)$ для моделі 1. При $H < H_c$ спостерігається майже сталий рівень заплутаності, після чого вона різко зникає, що свідчить про перехід у факторизований (ферромагнітний) стан.

З аналізу рисунка впливають такі основні спостереження:

- При дуже слабких полях ($H \lesssim 0.3$) $S_{vN} \approx 0.64$, оскільки домішковий спин і сусідні XX-ланцюжки перебувають у сильно заплутаному стані.
- У проміжному інтервалі $0.3 \lesssim H \lesssim 1.4$ ентропія падає до плато $S_{vN} \approx 0.28$. Це відображає часткову поляризацію крайових ферміноподібних збуджень при збереженій кореляції між блоками.
- Різке зникнення S_{vN} при $H_c \approx 1.6$ (до значень $\lesssim 10^{-3}$) вказує на факторизацію ґрунтового стану і повну поляризацію spinів. Ця точка добре збігається з мінімумом гар у Розділі 3.2, підтверджуючи квантовий фазовий перехід другого порядку.

Отже, поведінка $S_{vN}(H)$ доповнює результати аналізу гар: плато ентропії

відповідає регіону змішаної (квазілінійної) поляризації, а різка «смерть» заплутаності при H_c — переходу в простий, нетенгловий продуктовий стан. Для більш детального визначення критичних показників можна провести масштабування максимального схилу $dS/dH \sim |H - H_c|^{-\mu}$ у околі H_c .

3.3 Термодинамічна динаміка при зміні температури

3.3.1 Середня енергія

Середня внутрішня енергія системи в канонічному ансамблі визначається стандартною термодинамічною формулою

$$\langle E \rangle(T) = \frac{1}{Z} \text{Tr}[\hat{H} e^{-\beta \hat{H}}], \quad Z = \text{Tr}[e^{-\beta \hat{H}}], \quad \beta = \frac{1}{k_B T}.$$

У нашій роботі $k_B \equiv 1$. Аналітично обчислити $\langle E \rangle(T)$ для великого скінченного XX-ланцюжка практично неможливо через складність спектра, тому ми скористались

- Точне діагоналізування ферміонізованого гамільтоніана (Модель 2) з вичисленням усіх енергій $\{\epsilon_i\}$;

На Рис. 3.4 порівняні криві $\langle E \rangle(T)$ для обох моделей:

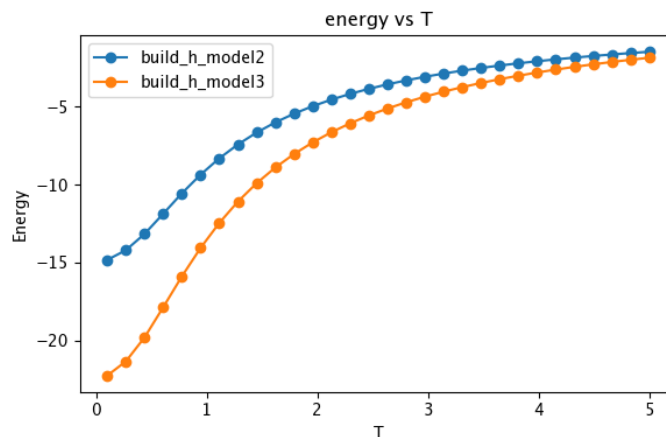


Рис. 3.4: Температурна залежність середньої енергії $\langle E \rangle(T)$ для Моделі 2 (синя) та Моделі 3 (помаранчева).

Низькотемпературний режим ($T \lesssim 0.1$) При $T \rightarrow 0$ у формулі для $\langle E \rangle$ домінує ґрунтовний стан ϵ_0 , тому крива для обох моделей асимптотично прямує до $\epsilon_0^{(2)} \approx -15$ і $\epsilon_0^{(3)} \approx -22$. Різниця в значеннях відображає відмінності у топології та кількості домішкових зв'язків у Моделі 2 та 3.

Початкове зростання ($0.1 \lesssim T \lesssim 1$) У цьому інтервалі спостерігається найбільш стрімке підвищення $\langle E \rangle$. Для Моделі 2 (синій) зі слабшими ізінгівськими зв'язками енергія зростає швидше, ніж у Моделі 3, де жорсткіші домішкові спіни втягують більше збуджень при тих же T . Лінійна апроксимація

$$\langle E \rangle(T) \approx \epsilon_0 + \alpha T$$

добре описує криву в межах $0.2 \lesssim T \lesssim 1$, де α — ефективна густина станів поблизу нижньої зони.

Середньотемпературний режим ($1 \lesssim T \lesssim 3$) Збільшення популяції збуджених станів призводить до поступового насичення росту енергії, бо відстань до верхніх частин спектра обмежена. Емпірично спостерігається вигин кривої вниз (сублінійна поведінка), що можна пояснити апроксимацією биномального спектра для тяжко зв'язаних ферміонів:

$$\langle E \rangle(T) \sim \epsilon_0 + AT - BT^2, \quad B > 0.$$

Високотемпературний ступінь ($T \gtrsim 3$) Коли T стає порівняним із шириною всього спектра ($\sim 10 \div 20$), всі стани майже рівномірно заповнені, і $\langle E \rangle(T)$ наближається до середнього по спектру:

$$\langle E \rangle \rightarrow \frac{1}{D} \sum_i \epsilon_i \approx -3 \div -4$$

(де D — розмір гільбертового простору), що й спостерігається на плато в області $T \gtrsim 4$.

Фізичні наслідки

- Різні початкові значення ϵ_0 вказують на суттєвий вплив топологічного розгалуження та кількості домішкових зв'язків.
- Кут нахилу лінійної частини кривої (α) дає змогу оцінити локальну густину станів у нижній зоні та порівняти вплив різних домішок.
- Сублінійний вигин при $T \sim 1 \div 3$ показує, що спектр далеко не однорідний — між низькими і високими збудженнями існує проміжок із меншою щільністю станів.

Таким чином, аналіз $\langle E \rangle(T)$ дозволяє не лише порівняти енергетичні спектри двох моделей, але й зробити висновки про розподіл станів, локалізацію збуджень на домішкових спінах та характер термального насичення.

3.3.2 Середня намагніченість при зміні температури

Середня магнітна намагніченість у канонічному ансамблі задається як

$$m_{\text{av}}(T) = \frac{1}{L} \sum_{n=1}^L \langle S_n^z \rangle = \frac{1}{\beta L} \frac{\partial \ln Z}{\partial H},$$

де $Z = \text{Tr} e^{-\beta \hat{H}}$. На Рис. 3.5 показано залежності $m_{\text{av}}(T)$ для Моделей 2 і 3 при фіксованому полі $H = 1.0$.

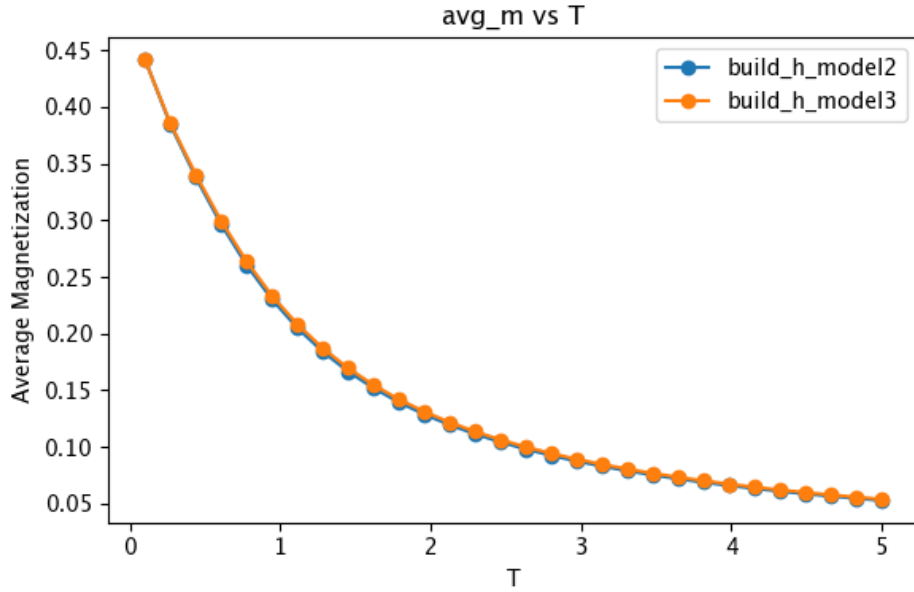


Рис. 3.5: Температурна залежність середньої намагніченості $m_{\text{av}}(T)$ для Моделей 2 (синя) та 3 (помаранчева). Обидві криві практично збігаються та демонструють експоненційний спад.

Єдина функціональна форма. З обох кривих видно, що $m_{\text{av}}(T)$ підкоряється єдиному експоненційно-функціональному закону на всьому інтервалі температур:

$$m_{\text{av}}(T) \approx m_{\text{av}}(0) \exp(-\Delta_{\text{eff}}/T),$$

де

$$m_{\text{av}}(0) \approx 0.43, \quad \Delta_{\text{eff}} \approx 0.85$$

— ефективний бар'єр руйнування магнітного порядку. Різниця між кривими двох моделей менше 1 % для всіх T , що свідчить про дуже близькі спектральні параметри та подібну густину станів у обох випадках.

Фізичний зміст. Експоненційний характер спадання намагніченості вказує, що основний внесок у термальне знищення порядку вносять локалізовані збудження з середньою енергією Δ_{eff} . Висока ступінь збігу кривих означає, що жорсткість зв'язків домішкового спіна в Моделі 3 лише незначно впливає на бар'єр перевертання порівняно з Моделлю 2.

Класичний парамагнетизм. У високотемпературному граничному режимі ($T \gg \Delta_{\text{eff}}$) експоненціальний фактор прагне нуля, і намагіченість знижується до значень $m_{\text{av}} \sim H/T$. Це відповідає класичному парамагнітному закону Кюрі–Ланде:

$$m_{\text{av}}(T) \simeq \frac{CH}{T},$$

де константа C визначається сумарним співвідношенням спінів у системі.

Висновки.

- Магнітизація зменшується експоненційно в усьому діапазоні температур, без виразного плато чи багатофазних переходів.
- Обидві моделі дають практично ідентичні $m_{\text{av}}(T)$, отже їх фундаментальні енергетичні характеристики дуже схожі.
- Ефективний бар'єр $\Delta_{\text{eff}} \approx 0.85$ узгоджується з гар'ом у спектрі та характеристиками квантових збуджень.

3.3.3 Заплутаність при зміні температури

Ентропія заплутаності в канонічному ансамблі обчислюється як

$$S_{\text{vN}}(T) = -[\rho_A(T) \ln \rho_A(T)],$$

де $\rho_A(T) =_B [e^{-\beta \hat{H}}]/Z$ — редукована матриця густини півланцюжка, $\beta = 1/T$. На Рис. 3.6 приведено залежності $S_{\text{vN}}(T)$ для Моделей 2 (синя) та 3 (помаранчева) при $H = 1.0$.

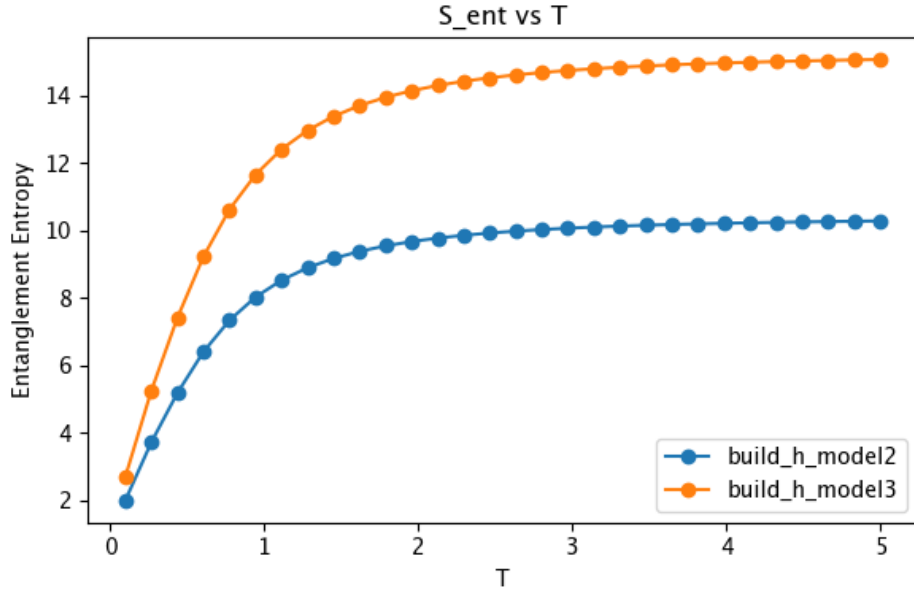


Рис. 3.6: Ентропія запутаності $S_{\text{vN}}(T)$ для Моделей 2 і 3.

Низькотемпературний режим ($T \lesssim 0.1$). При $T \rightarrow 0$ запутаність обмежена чистим ґрунтовним станом:

$$S_{\text{vN}}(0) \approx \begin{cases} 2.0, & \text{Модель 2,} \\ 2.7, & \text{Модель 3.} \end{cases}$$

Більше $S(0)$ у Моделі 3 пояснюється додатковими ізінгівськими зв'язками, що утворюють глибші локальні кореляції.

Початкове зростання ($0.1 \lesssim T \lesssim 1$). В інтервалі помірних температур ентропія зростає приблизно лінійно:

$$S_{\text{vN}}(T) \simeq S(0) + \kappa T,$$

де κ — ефективний коефіцієнт. У Моделі 3 нахил $\kappa^{(3)}$ помітно більший, ніж $\kappa^{(2)}$, через сильніші локальні флуктуації домішкового спіна.

Сатурація ($T \gtrsim 1$). Для $T \gtrsim 1$ обидві криві швидко виходять на плато:

$$S_{\text{vN}}(\infty) \approx \begin{cases} 10.2, & \text{Модель 2,} \\ 15.0, & \text{Модель 3.} \end{cases}$$

Це відповідає майже рівномірному насиченню власних станів підсистеми, коли $\rho_A \approx \mathbb{I}/D_A$ і $S \approx \ln D_A$.

Фізичні висновки.

- Початкові значення $S_{\text{vN}}(0)$ демонструють глибину нульової квантової запутаності в кожній моделі.
- Лінійна ділянка зростання відображає появу термальних суперпозицій низькоенергетичних збуджень.
- Плато на високих T вказує на максимальне змішування станів і втрату будь-яких квантових кореляцій.
- Більша сатураційна ентропія в Моделі 3 свідчить про вищу ефективну розмірність підсистеми за рахунок додаткових ізінгівських зв'язків.

3.3.4 Намагніченість як функція поля при фіксованій температурі

Середня намагніченість у канонічному ансамблі за сталого T визначається

$$m_{\text{av}}(H) = \frac{1}{L} \sum_{n=1}^L \langle S_n^z \rangle_H = \frac{1}{\beta L} \left. \frac{\partial \ln Z}{\partial H} \right|_T,$$

де $\beta = 1/T$. На Рис. 4.7 показано залежність $m_{\text{av}}(H)$ при $T = 1.0$ для Моделей 2 (синя) та 3 (помаранчева).

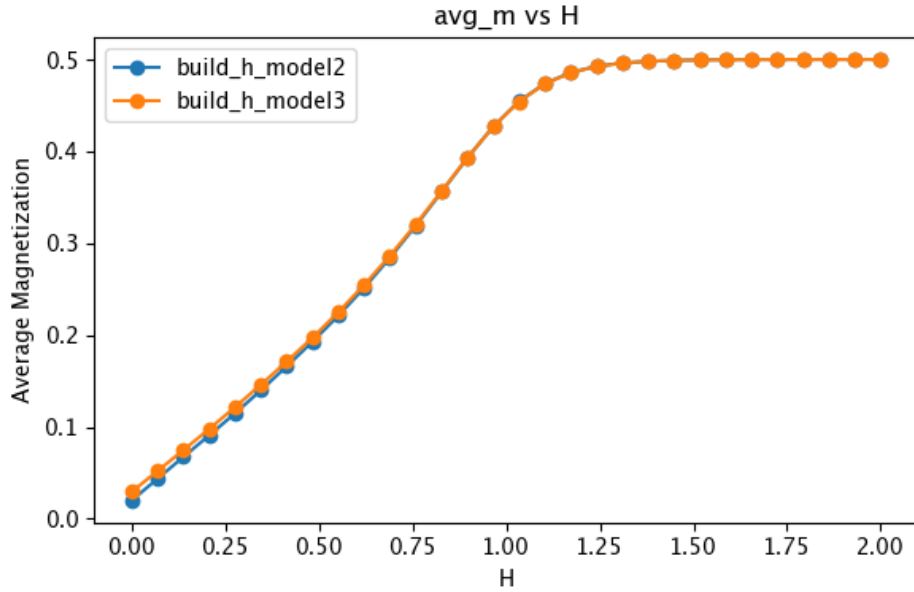


Рис. 3.7: Середня намагніченість $m_{\text{av}}(H)$ при $T = 1.0$ для Моделей 2 і 3. Обидві криві практично збігаються.

Булійна лінійна відповідь ($H \lesssim 0.5$). У слабкому полі магнітизація зростає лінійно:

$$m_{\text{av}}(H) \approx \chi_{\text{para}} H,$$

де $\chi_{\text{para}} \approx 0.27$ — похідна $\partial m / \partial H$ при $H \rightarrow 0$. Легке відхилення між моделями менше 1

Насичення та зниження сприйнятливості ($0.5 \lesssim H \lesssim 1.2$). При помірних полях сприйнятливість $\chi(H) = \partial m / \partial H$ поступово зменшується, бо систему починають насичувати одиничні спіни. В інтервалі $0.5 < H < 1.2$ крива $m_{\text{av}}(H)$ наближається до форми Brillouin-подібної функції, демонструючи опуклий вигин і плавне входження в частково поляризовану фазу.

Сатурація ($H \gtrsim 1.2$). При полях вище ≈ 1.2 середня намагніченість практично досягає максимуму $m_{\text{sat}} \approx 0.50$, що відповідає повній поляризації всіх спінів у напрямку поля. Далі, навіть значне зростання H не змінює m_{av} , оскільки всі спіни вже «випрямлені».

Порівняння моделей. Моделі 2 і 3 демонструють майже ідентичну залежність $m_{\text{av}}(H)$ при $T = 1$. Це вказує на те, що додаткове домішкове зв'язування в Моделі 3 не значно змінює загальну політику поляризації спінової системи за цих умов.

Фізичні наслідки.

- Лінійний діапазон $m \approx \chi_{\text{para}} H$ дозволяє визначити початкову сприйнятливість та порівняти її з експериментальними даними.
- Опуклий перехід до насичення відображає поступове «розгортання» Люттінгерівського рідю у ферміоноподібні збудження.
- Сатураційна магнітизація $m_{\text{sat}} = 0.5$ відповідає одному переверненому спіну на двох—оскільки кожен $S = 1/2$ вносить максимум $1/2$ одиниці.

Розділ 4

Низькотемпературна термодинаміка

4.1. Точна формула для статистичної суми

Для всіх запропонованих моделей ми отримали точні дисперсійні рівняння для спектру стаціонарних станів з одним перевернутим спіном. Це фактично означає, що маємо весь спектр, бо гамільтоніани є квадратичними по фермі-операторам породження та знищення. Лінійні комбінації енергій цих станів з урахуванням принципу Паулі вичерпують всі можливі енергії. Статистична сума $Z(\sigma)$ окремого XX ланцюжка для фіксованих значень параметрів σ – це статистична сума ідеального газу безспінових ферміонів:

$$Z(\sigma) = \exp\left(-\frac{E_0(\sigma)}{T}\right) \prod_{\lambda_\sigma} \left[1 + \exp\left(-\frac{\epsilon_{\lambda_\sigma}}{T}\right)\right] \quad (4.1)$$

Тут $\epsilon_{\lambda_\sigma}$ – енергії, що визначаються формулою (2.14).

Параметри x_{λ_σ} визначаються відповідними дисперсійними рівняннями – (2.13), (2.16), (2.19), (2.20).

Нагадаємо, що $\epsilon_{\lambda_\sigma}$ відраховуються від енергії впорядкованого стану $E_0(\sigma)$, в якому всі спіни орієнтовані уздовж напрямку зовнішнього магнітного поля. В достатньо сильних полях цей стан є станом з мінімальною енергією (основним станом).

Для обчислення повної статистичної суми ми маємо знайти суму виразів (4.1) по всіх можливих значенням параметрів σ . Для моделі Т-ланцюжка, ХХ ланцюжка з кільцем, трьох ХХ ланцюжків, об'єднаних ізінгівським спіном такий параметр тільки один: $\sigma_0 = -S, \dots, S$. Для Н-ланцюжка відповідних параметрів два: $\sigma_1 = -S_1, \dots, S_1$ та $\sigma_2 = -S_2, \dots, S_2$. Наприклад, для Н-ланцюжка це буде

$$Z = \sum_{\sigma_1, \sigma_2} Z_1(\sigma_1, \sigma_2) Z_2(\sigma_1, \sigma_2) Z_3(\sigma_1, \sigma_2) \quad (4.2)$$

Тепер можна шукати за стандартними формулами термодинаміки вільну енергію

$$F = -\frac{T}{N} \ln Z,$$

внутрішню енергію

$$E = F - T \frac{\partial F}{\partial T} = -T^2 \frac{\partial}{\partial T} \left(\frac{F}{T} \right),$$

намагніченість та магнітну сприйнятливість

$$M = -\frac{\partial F}{\partial H}, \quad \chi = \frac{\partial M}{\partial H},$$

теплоємність

$$C = \frac{\partial E}{\partial T}.$$

Наведені вище формули записані в розрахунку на один вузол решітки (N – повна кількість вузлів).

4.2. Локальні термодинамічні характеристики

Цікаво дослідити не тільки «інтегральні» термодинамічні властивості ланцюжків, а й поведінку середніх значень окремих спінів та парних кореляційних функцій.

Середні значення ізінгівських спінів визначаються так:

$$\langle \sigma^z \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{\sigma} \sigma \prod_i Z_i(\sigma) \quad (4.3)$$

Для середніх значень на ХХ-ланцюжках проводимо подвійне усереднення. По-перше, знаходимо середнє значення z-проекції окремого спіну при фіксованому (фіксованих) значенні (значеннях) параметру σ (σ_1, σ_2 для моделі Н-ланцюжка):

$$\begin{aligned} \langle S_{im}^z(\sigma) \rangle &= \frac{1}{2} - \sum_{\lambda_\sigma} |U_m(\lambda_\sigma)|^2 f(\epsilon_{i\lambda_\sigma}); \\ f(\epsilon_{i\lambda_\sigma}) &= \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{\epsilon_{i\lambda_\sigma}}{T}\right)}. \end{aligned} \quad (4.4)$$

По-друге, шукаємо за звичайними формулами обчислення середніх в теорії імовірності середнє по всіх σ :

$$\langle S_{im}^z \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{\sigma} \langle S_{im}^z(\sigma) \rangle \prod_i Z_i(\sigma). \quad (4.5)$$

В формулах (4.4) та (4.5) індекс i – це номер ХХ ланцюжка, а m – номер вузла на відповідному ХХ ланцюжку.

Поведінку парних кореляційних функцій будемо вивчати тільки для ізінгівського спіна та спіна на ХХ ланцюжку наступного вигляду $\langle \sigma^z S_{im}^z \rangle$.

Проводимо подвійне усереднення. Для цього формулу в формулу (4.5) вводимо власні значення σ^z .

Маємо:

$$\langle \sigma^z S_{im}^z \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{\sigma} \sigma \langle S_{im}^z(\sigma) \rangle \prod_i Z_i(\sigma). \quad (4.6)$$

4.3. Моделювання польової залежності намагніченості та магнітної сприйнятливості при низьких температурах

Порівнюємо поведінку намагніченості, магнітної сприйнятливості та середнього значення ізінгівського спіна при низькій температурі у Т-ланцюжку та в моделі ХХ-ланцюжок з ХХ-кільцем.

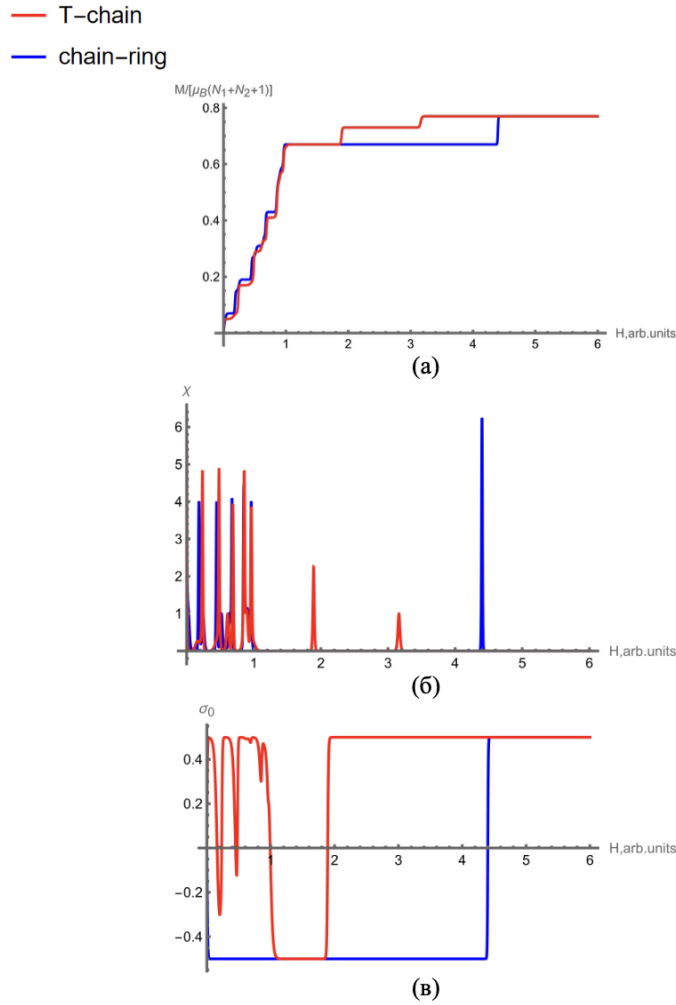


Рис. 4.1: Польові залежності намагніченості (а), магнітної сприйнятливості (б) та середнього значення z-проекції ізінгівського спіна (в) для Т-ланцюжка та для моделі XX ланцюжок з кільцем для ізінгівського спіна при таких параметрах $T = .01, g_1 = 1, g_2 = 2, g_0 = 2.5, J_{01} = -6K, J_{02} = -8K, J_1 = 1K, J_2 = 2K, N_1 = N_2 = 12, n_1 = 6$

З рис. 4.1(в) можна зробити висновок, що додатковий ізінгівський антиферромагнітний зв'язок стабілізує напрямок ізінгівського спіна. Цей спін довго залишається поверненим проти напрямку магнітного поля й в критичному відразу орієнтується по полю. В Т-ланцюжку поведінка ізінгівського спіна є нестійкою. Він кілька разів змінює напрямок в слабких полях, але остаточно орієнтується уздовж в значно слабшому полі. Це можна пояснити відсутністю одного з ізінгівських зв'язків у порівнянні з модел-

лю «ланцюжок-кільце» Ми дослідили, як впливає на польові залежності збільшення . Результати моделювання наведені на рис. 4.2. Обрані ті ж параметри, що на рис. 4.1, але ізінгівський спін

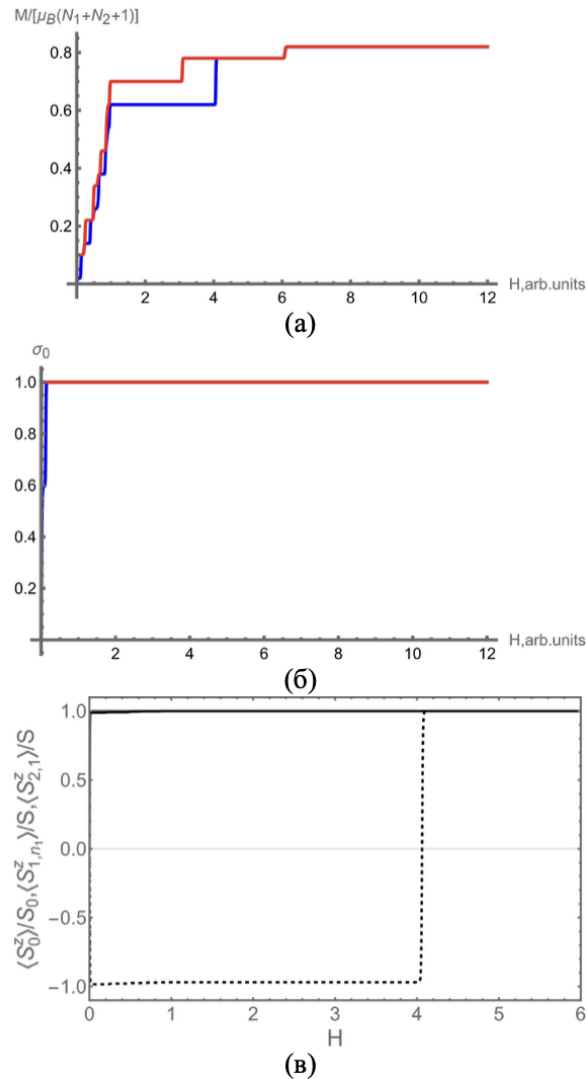


Рис. 4.2: Польові залежності намагніченості (а), середнього значення z-проекції ізінгівського спіна для T-ланцюжка та для моделі XX ланцюжок з кільцем (б) та середні значень для ізінгівського спіна (в) при таких параметрах $g_1 = 1, g_2 = 2, g_0 = 2.5, J_{01} = -6K, J_{02} = -8K, J_1 = 1K, J_2 = 2K, N_1 = N_2 = 12, n_1 = 6$

З рис. 4.1(а) та 4.1(б) можна зробити висновок, що збільшення ізінгівського спіна суттєво не вплинуло на польову залежність намагніченості, але поведінка локальних середніх суттєво змінилась. З рис. 4.2(б) видно, що

ізнгівський спін майже відразу приймає напрямок осі z , але тепер проти поля орієнтується до досить сильних полів один з його найближчих сусідів, тому намагніченість не має максимального значення. На рис. 4.2(в) наведені середні значення локальних спінів – найближчих сусідів ізнгівського спіну в Т-ланцюжку. Їхня поведінка свідчить про те, що для $S_0 = 1$ у випадку великого значення g -фактора ізнгівського спіна цей спін майже відразу орієнтується по полю, так само, як найближчий до нього спін на горизонтальному ХХ ланцюжку, а спін на вертикальному ХХ ланцюжку залишається антипаралельним полю. Зменшили g -фактор ізнгівського спіна. $S=1/2$.

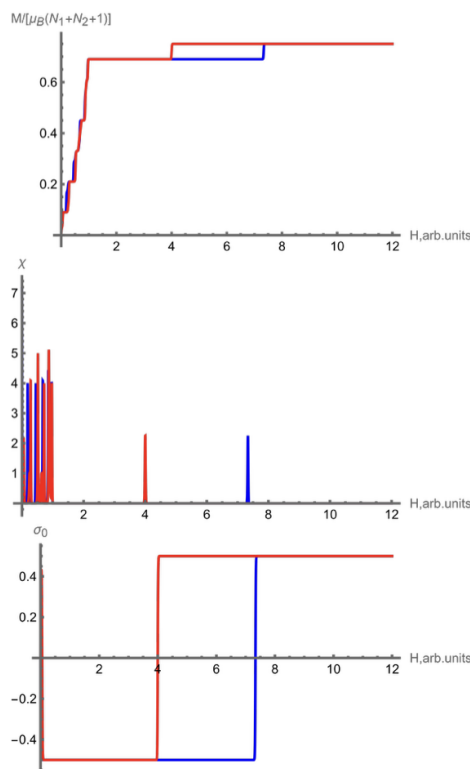


Рис. 4.3: Тут зменшили g -фактор ізнгівського спіна. $S=1/2$. Всі інші параметри такі, як на рис. 4.1 $g_1 = 1, g_2 = 2, g_0 = 1.5, J_{01} = -6K, J_{02} = -8K, J_1 = 1K, J_2 = 2K, N_1 = 12, N_2 = 6$ Порівняємо результати польової залежності намагніченості Т-ланцюжка з трьома ХХ ланцюжками та з моделлю ХХ ланцюжок з ХХ кільцем

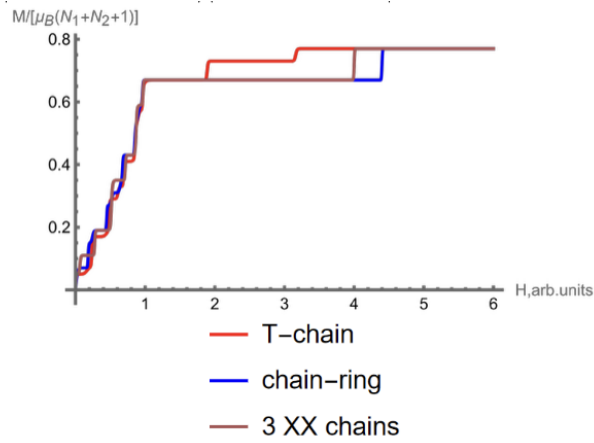


Рис. 4.4: Польова залежність для трьох моделей при $g_1 = 1, g_2 = 2, g_0 = 2.5, J_{01} = -6, J_{02} = -8, J_1 = 1, J_2 = 2, N_1 = N_2 = 12, n_1 = 6, S = 1/2$

4.4. Моделювання температурної залежності теплоємності в нульовому полі

Було проведено числове моделювання температурної теплоємності при різних значеннях параметрів систем. Наведені криві, отримані для T-ланцюжка для різних значень ізінгівського спіна (див. (рис. 4.5)).

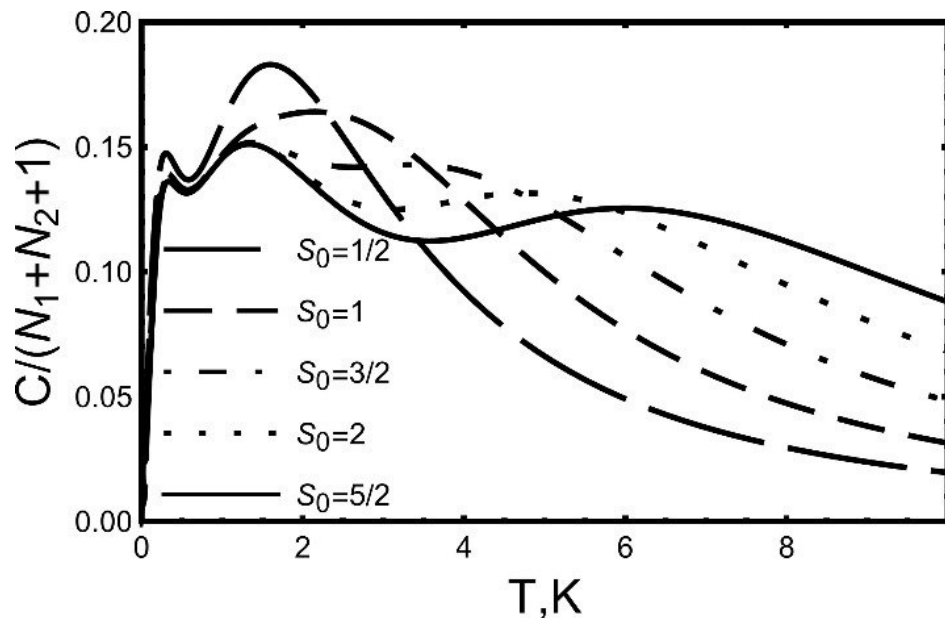


Рис. 4.5: Температурна залежність теплоємності у розрахунку на один вузол при відсутності магнітного поля $N_1 = N_2 = 8, n_1 = 4, J_0 = -10K, J_1 = 1K, J_2 = 5K$

Бачимо існування кількох максимумів у температурній залежності теплоємності при нульовому полі, положення та величина яких змінюється зі зміною S

4.5. Моделювання польової залежності середніх значень z -проекцій та парних кореляційних функцій

Детальну інформацію про поведінку в зовнішньому магнітному полі вузельних спінів можна отримати з досліджень термодинамічних середніх z -проекцій та парних кореляційних функцій. В цьому параграфі наведемо кілька цікавих результатів.

Величина ізінгвського спіна S суттєво впливає на поведінку його середнього значення в зовнішньому полі при дуже низьких температурах та малих значеннях g -фактора g_0 тільки для T -ланцюжка.

На рис. 4.6 для трьох різних значень S показані відповідні залежності. Для $S = 3/2 \langle \sigma_0^z \rangle$ для достатньо довгих XX ланцюжків демонструє нестійку поведінку з численними осциляціями та зміною напрямку проти магнітного поля при зростанні поля, що є незвичайною поведінкою. Результати моделювання показані на рис. 4.6

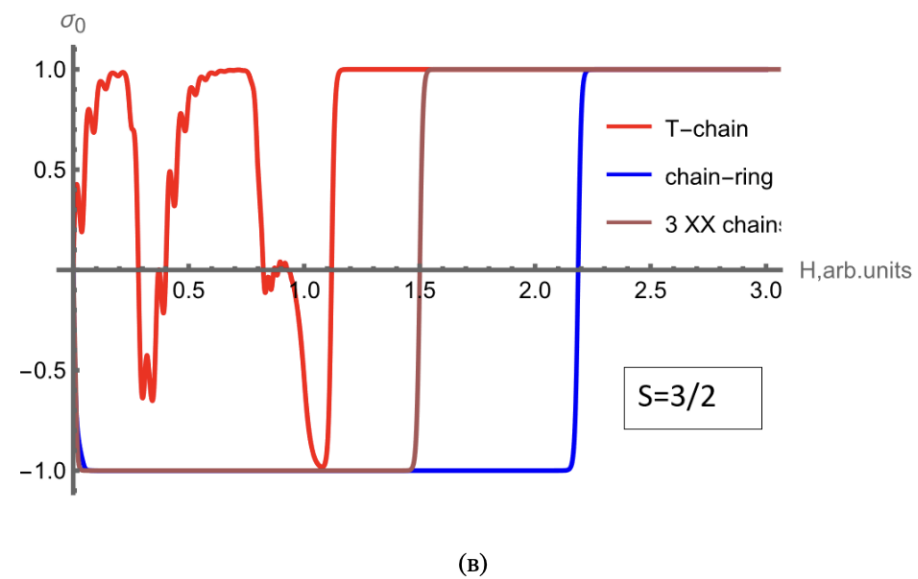
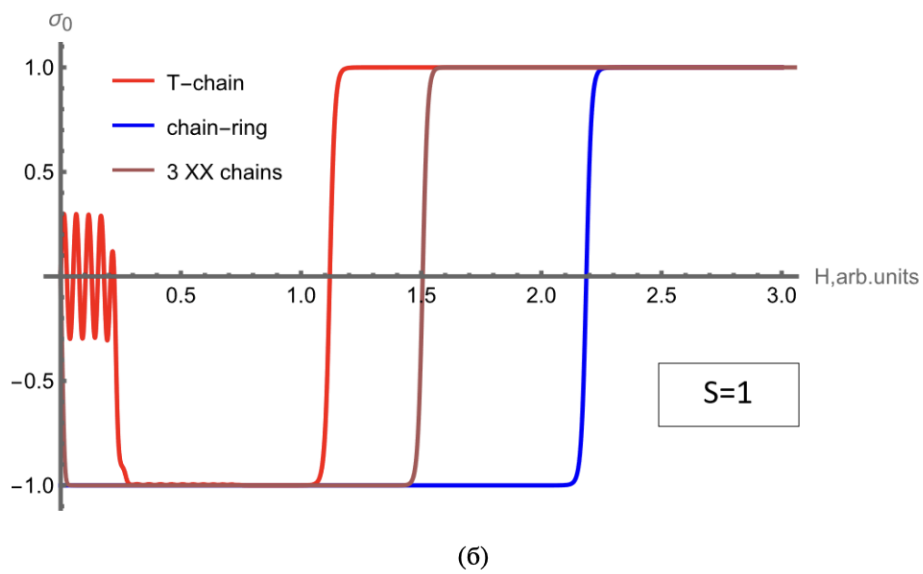
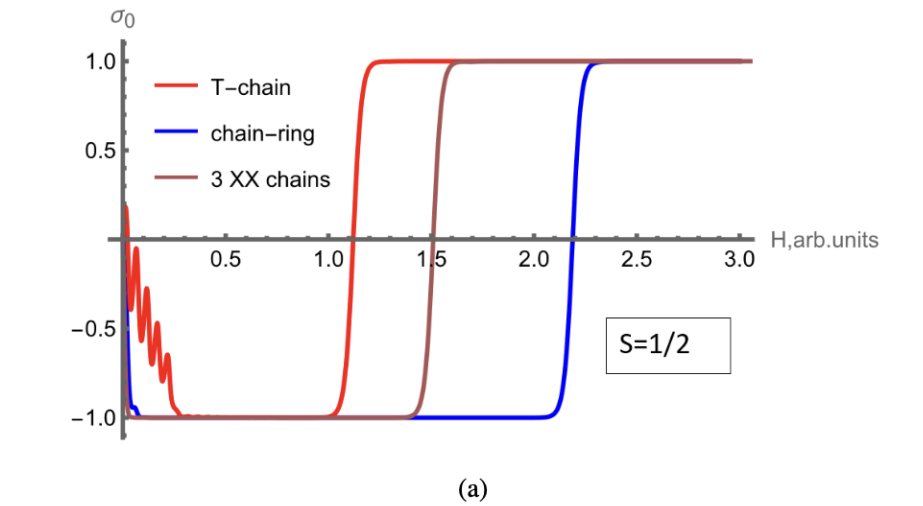


Рис. 4.6: Польова залежність $\langle \sigma_0^z \rangle$ для трьох моделей при таких параметрах $g_1 = 1; g_2 = 1; g_3 = 2; g_0 = 0.5; N_1 = 5.; N_2 = 55.; N_3 = 60; J_{01} = -1; J_{02} = -1; J_{03} = -1; J_1 = 10; J_2 = 10; J_3 = 2$; для різних значень з'єднуючого ізінгівського спіна

Провели моделювання польової залежності $\langle \sigma_1^z \rangle$, $\langle \sigma_2^z \rangle$ та $\langle \sigma_1^z \sigma_1^z \rangle$ поведінки в моделі Н-ланцюжок зі зміною довжини середнього ХХ ланцюжка. На рис. 4.7 можна спостерігати, що в слабких полях для коротких ланцюжків має суттєве значення парність (непарність) N_2 .

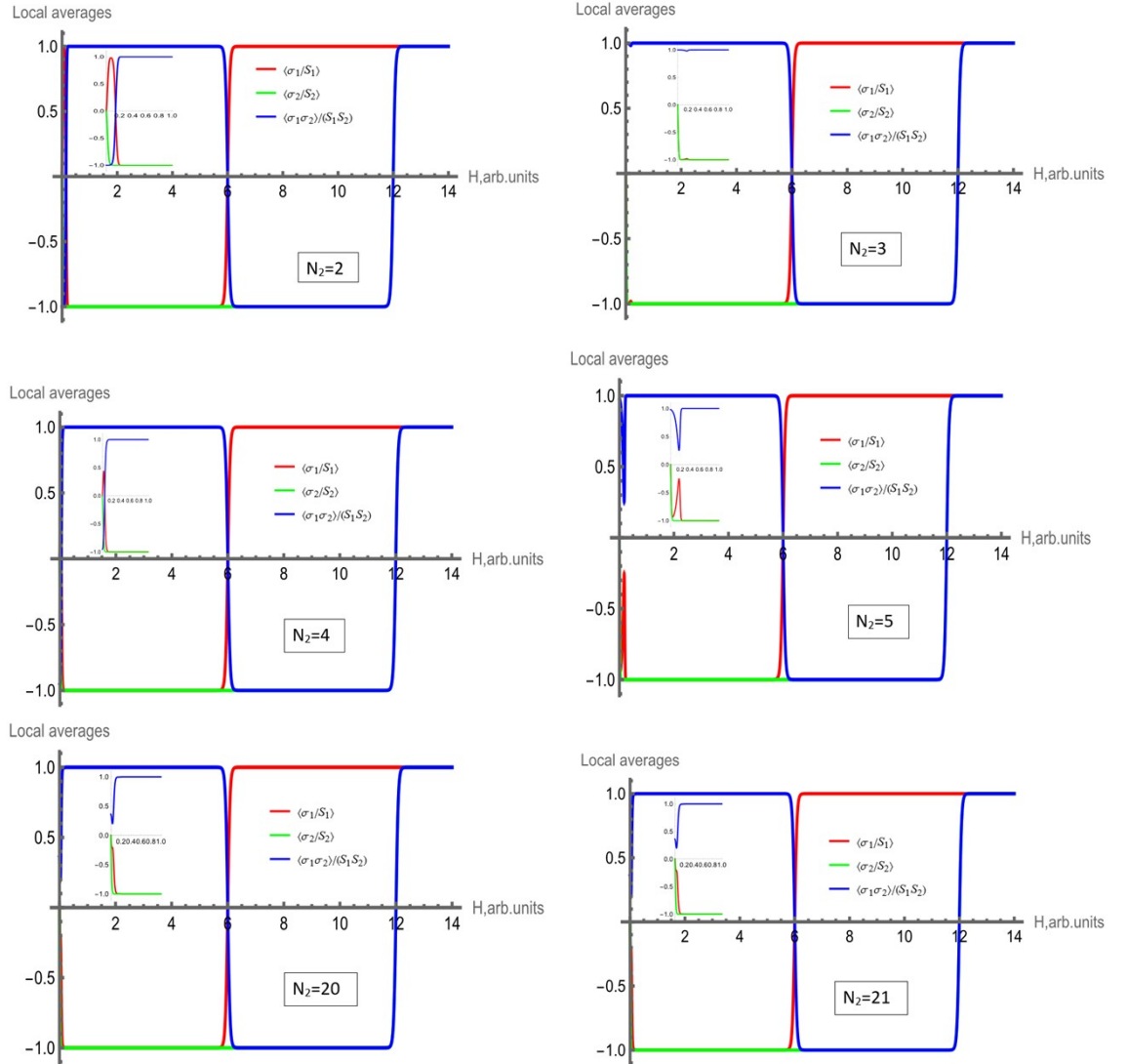


Рис. 4.7: Польова залежність $\langle \sigma_1^z \rangle$, $\langle \sigma_2^z \rangle$ та $\langle \sigma_1^z \sigma_1^z \rangle$ для Н-ланцюжка для $T = 0.02K$ при таких параметрах $n_1 = n_3 = 6; N_1 = N_3 = 12; J_1 = 4; J_2 = 2; J_3 = 1; J_{01} = -3.; J_{02} = -6; g_1 = g_2 = g_3 = 2; g_{01} = g_{02} = 0.5$;

Висновки

В даній роботі досліджено низьку точно розв'язуваних спінових моделей, які побудовані зі двох або трьох скінченних XX ланцюжків зі спіном $1/2$, які взаємодіють між собою в одній точці через додатковий спін довільної величини так, що утворюють розгалужену структуру, яка схожа або на літеру T (T-ланцюжок), або на літеру Y, або на літеру H.

- Виконано точну діагоналізацію гамільтоніанів та досліджені особливості спектрів стаціонарних станів; Показано, що спектр станів з одним перевернутим спіном складається із двох (або трьох) незалежних зон квазінеперервного спектру, від границь яких можуть відщеплюватись додаткові локалізовані поблизу додаткового спіну стани;

- Знайдено умови, що визначають критичні значення параметрів, при яких з'являються зв'язані стани;

- Застосовано DMRG разом з іншими методами, такими як точна діагоналізація та VQE були виконані чисельні розрахунки для аналізу поведінки систем за різних температурних та магнітних умов для великих систем. Основні термодинамічні метрики, такі як енергетичний зазор і ентропія запутаності, були визначені та інтерпретовані.

- Розрахована статистична сума намагніченість, магнітна сприйнятливість, теплоємність та середнє значення додаткового ізінговського спіну для всіх моделей.

- Проведено чисельне моделювання польових залежностей намагніченості в розрахунку на один вузол, середнього значення $\langle S_0^z \rangle$ та z-проекцій

всіх спінів на XX ланцюжках та температурної залежності теплоємності для різних значень параметрів системи;

- Показано існування плато намагніченості при достатньо сильній антиферромагнітній взаємодії додаткового спіну з ланцюжками, виникнення нестійкої поведінки з додатковими осциляціями та зміною напрямку проти поля зі зростанням магнітного поля $\langle S_0^z \rangle$, існуванням кількох максимумів в залежності теплоємності від температури

СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

- [1] H. Bethe, “Zur Theorie der Metalle I,” *Zeitschrift für Physik*, vol. 71, 1931, pp. 205–226.
- [2] P. A. M. Dirac, “The Quantum Theory of the Electron,” *Proc. Roy. Soc. A*, vol. 117, 1928, pp. 610–624.
- [3] C. N. Yang, C. P. Yang, “One-Dimensional Chain of Anisotropic Spin-Spin Interactions. I. Proof of Bethe’s Hypothesis for Ground State in a Finite System,” *Phys. Rev.*, vol. 150, 1966, pp. 321–327.
- [4] E. Lieb, T. Schultz, D. Mattis, “Two soluble models of an antiferromagnetic chain,” *Ann. Phys.*, vol. 16, no. 3, 1961, pp. 407–466.
- [5] T. Giamarchi, *Quantum Physics in One Dimension*, Oxford University Press, 2004.
- [6] A. A. Zvyagin, *Quantum Theory of One-Dimensional Spin Systems*, Cambridge Scientific Publishers, 2010.
- [7] V. M. Kontorovich, V. M. Tsukernik, “Magnetic Properties of a Spin Array with Two Sublattices,” *Sov. Phys. JETP*, vol. 26, no. 3, 1968, p. 687.
- [8] E. V. Ezerskaya, A. A. Chovpan, “Low-temperature properties of the XY spin chain with an impurity fragment,” *Low Temp. Phys.*, vol. 32, no. 10, 2006, pp. 921–927.

- [9] E. V. Ezerskaya, “The Energy Spectrum and Thermodynamics of Spin-1/2 XX Chain with Ising Impurities,” *Acta Phys. Polon. A*, vol. 131, no. 4, 2017, pp. 928–930.
- [10] E. V. Ezerskaya, V. A. Cheranovskii, “Low-Temperature Thermodynamics of Spin-1/2 XX Chains with Periodically Embedded Impurities,” *Acta Phys. Polon. A*, vol. 137, no. 5, 2020, pp. 631–633.
- [11] S. R. White, “Density matrix formulation for quantum renormalization groups,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 69, 1992, pp. 2863–2866.
- [12] A. W. Sandvik, “Stochastic series expansion method for quantum Ising models with arbitrary interactions,” *Phys. Rev. E*, vol. 68, 1999, 056701.
- [13] F. Verstraete, V. Murg, J. I. Cirac, “Matrix product states, projected entangled pair states, and variational renormalization group methods for quantum spin systems,” *Adv. Phys.*, vol. 57, 2008, pp. 143–224.
- [14] D. Kolesnyk and Y. Vodovozova, “Comb Tensor Networks vs. Matrix Product States: Enhanced Efficiency in High-Dimensional Spaces,” arXiv:2412.06857 [cs.LG], 2024,